

**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**  
**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**



**TESIS DOCTORAL**

**Estructura del CS<sub>2</sub> líquido : estudio por Montecarlo**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR  
PRESENTADA POR

**Alberto Bañón Serrano**

DIRECTOR:

**Jesús Santamaria Antonio**

**Madrid, 2015**



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE



5322359798

T1

544

BAÑ

ALBERTO BAÑON SERRANO

b16216647

i 36008722

ESTRUCTURA DEL  $\text{CS}_2$  LÍQUIDO.

ESTUDIO POR MONTECARLO.

DIRECTOR: JESUS SANTAMARIA ANTONIO

DEPARTAMENTO DE QUIMICA FISICA

FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE

MADRID, SEPTIEMBRE 1981



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS  
BIBLIOTECA

Este trabajo ha sido realizado en el Departamento de Química Física de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense, bajo la dirección del Dr. Jesús Santamaria Antonio, Profesor Adjunto del citado Departamento, a quien expreso mi sincero agradecimiento.

Asimismo doy las gracias al Profesor D. Mateo Díaz Peña por haber aceptado la presentación de este trabajo como Tesis Doctoral.

Hago extensivo mi agradecimiento a todos los que de alguna manera han colaborado en la realización de este trabajo, y en especial al Dr. M. Lombardero Díaz, por el interés con que lo ha seguido.

Gran parte de los cálculos numéricos a que se hace referencia en esta memoria se han realizado en el Centro de Cálculo de la Junta de Energía Nuclear, con cuya Dirección y Personal tengo una deuda de gratitud.

Finalmente agradezco al Ministerio de Educación y Ciencia la concesión de una beca del INAPE durante el tiempo de realización de este trabajo.

## INDICE

	<u>Pag.</u>
Introducción .....	1
I.-Modelos del potencial duro del CS <sub>2</sub> .....	8
1.1.-El modelo para el fluido .....	9
1.2.-Propiedades calculadas .....	14
1.3.-Control del método .....	19
1.4.-Casos estudiados .....	28
1.5.-Funciones de distribución radial entre cen- tros .....	33
1.6.-Función de distribución molecular .....	51
1.7.-Ecuación de estado .....	86
II.- Simulaciones con potencial continuo .....	90
2.1.-Introducción .....	91
2.2.-Método .....	93
2.3.-Magnitudes calculadas .....	93
2.4.-Cálculo con movimientos singulares .....	95
2.5.-Cálculo con movimientos múltiples .....	113
III.- Aplicación a la teoría de perturbaciones ...	118
3.1.-Introducción .....	119
3.2.-Aproximación de la teoría de perturbaciones	120
3.3.-Elección clásica del sistema de referencia,	124
3.4.-Sistema de referencia con parámetros rea- listas .....	143
3.5.-Aplicación del desarrollo de perturbaciones a la elección de parámetros de potencial ..	149
Resumen y conclusiones .....	156

→

Bibliografía .....	161
--------------------	-----

Apéndices : .....	167
-------------------	-----

A.- Método de cálculo MC para sistemas lineales con potencial rígido .....	168
---	-----

B.- Método de simulación MC para sistemas linea <u>l</u> les con potencial continuo .....	171
--	-----

C.- Función de distribución molecular $g(r, \theta_1, \theta_2, \psi)$ del $CS_2$ con potencial de Lennard-Jones, 12:6..	176
---	-----

## INTRODUCCION

## Motivación

En los últimos años se ha producido un gran avance en el conocimiento del estado líquido<sup>1-3</sup>, tanto desde el punto de vista experimental como teórico, comenzándose el estudio de los líquidos constituidos por moléculas sin simetría esférica<sup>4-6</sup>.

En cuanto al desarrollo experimental, la principal aportación ha surgido en los experimentos de difracción<sup>5-7</sup> de rayos X y neutrones, que han permitido determinar el factor de estructura y en algunos casos especialmente favorables, las funciones de distribución radial de los núcleos.

Del lado teórico, han surgido nuevos modelos para describir las interacciones entre partículas<sup>8-10</sup>, que tienen en cuenta la naturaleza de éstas de una forma mucho más realista que los primeros modelos de potencial surgidos para moléculas no esféricas, como fué el potencial de Kihara<sup>11</sup>.

De todos los modelos no cabe duda de que el que más atención ha recibido, y se ha empleado más extensamente, consiste en considerar la molécula formada por tantos centros de interacción como sea necesario<sup>12</sup>, generalmente coincidiendo con el número de núcleos y en la localización de éstos (modelo ISM, interaction site model). Un caso particular de éste último es el HISM (hard interaction site model) para esferas duras fundidas.

Las teorías que a partir de estos modelos rígidos (HISM) evalúan las propiedades termodinámicas y estructurales de líquidos moleculares, son generalizaciones a las existentes para el caso monocéntrico, como ocurre con los desarrollos de perturbación (el B-H ampliado recientemente<sup>13</sup>, y en la práctica el WCA generalizado por

Tildesley<sup>14</sup>) o la ecuación de P-Y extendida por Chandler y col<sup>15-18</sup> (teoría RISM).

Desgraciadamente todas estas teorías conllevan una serie de aproximaciones, para las que además en la mayoría de las ocasiones no se puede ni siquiera estimar su influencia en los resultados. - Esto conduce a una incertidumbre en la comparación con los datos - experimentales, que no permite atribuir las diferencias encontradas al modelo de potencial o a las aproximaciones introducidas en la teoría<sup>20</sup>.

A mitad de camino entre las medidas experimentales y los cálculos teóricos se han desarrollado los métodos de simulación<sup>21-22</sup>; en éstos una vez establecido el modelo de potencial, no se hacen - más hipótesis hasta obtener los resultados, lo que de un lado permite realizar directamente y sin ambigüedades comparaciones entre el modelo asumido y los valores medidos, y por otra parte, determinar el peso de las aproximaciones efectuadas por la teoría.

De estas consideraciones y del hecho de que ciertas propiedades, actualmente, sólo son evaluables por simulación, se desprende la enorme importancia de estos trabajos, virtualmente indispensables para el desarrollo del estado líquido, y de aquí el origen - del trabajo que a continuación se expone.

### Elección del método

Dentro de la simulación se abren las dos opciones de cálculo bien conocidas: Dinámica Molecular (DM) y Monte Carlo (MC).

La DM es formalmente el método más potente, pues permite, en teoría, determinar tanto las propiedades configuracionales como - las dinámicas del sistema; mientras que por cálculos MC éstas últi



mas no son accesibles.

Sin embargo la DM es mucho más compleja de utilizar, ya que - necesita resolver las ecuaciones del movimiento de partículas con grados de libertad traslacionales y cuanto menos rotacionales; esto, naturalmente, restringe enormemente su aplicabilidad a casos especialmente sencillos<sup>24-27</sup>. Por otro lado es prácticamente imposible el estudio mediante este método de líquidos compuestos por partículas para las que se asume un potencial de interacción del tipo de esferas duras fusionadas y que son de gran importancia, tanto por lo adecuado de este modelo en algunas ocasiones, como por tratarse del sistema de referencia en el tratamiento de perturbaciones de B-H y generalizaciones de éste.

Estos problemas no existen en el método de MC, que es razonablemente sencillo de aplicar, aún a las moléculas más complejas<sup>28</sup>, y para el cual el potencial de esferas fusionadas es una ventajosa simplificación<sup>29</sup>.

Puesto que una parte importante de nuestro interés es por el mencionado potencial de esferas fusionadas, nuestra elección del método ha tenido que recaer necesariamente en el método de MC.

### Objeto de estudio

Todo nuestro trabajo se ha centrado en el fluido CS<sub>2</sub>. Este ha sido ampliamente estudiado con anterioridad, desde los diferentes puntos de vista; experimental<sup>30-32</sup>, teórico<sup>16, 33</sup> y de la simulación<sup>34, 35</sup>, si bien los distintos trabajos no son directamente comparables y sobre todo en ninguno de ellos se ha abordado con precisión el estudio de la estructura que viene reflejada directamente en la función de distribución molecular y de la cual sólo se han obtenido hasta ahora aproximaciones por desarrollo en serie; así -

como tampoco se ha estudiado la variación de la estructura de este fluido con la densidad.

Esta memoria ha sido dividida en tres capítulos, con entidad propia, dedicados al  $\text{CS}_2$ , y guardan entre sí una estrecha relación, siendo cada uno complemento de los otros dos.

En el capítulo primero se han realizado una serie de simulaciones en las que las moléculas de  $\text{CS}_2$  vienen descritas por tres centros de interacción con un modelo de potencial rígido, empleando diferentes parámetros y varias densidades, en el cual se analiza no sólo la validez del modelo, sino distintos aspectos relacionados con las teorías para este modelo.

En el segundo capítulo se simula un sistema donde se han introducido las fuerzas atractivas considerando interacciones tipo -L-J 12:6; y en el tercer capítulo se analiza la teoría de perturbaciones B-H generalizada por Lombardero y col.<sup>13</sup>, y que es puente de unión entre el sistema de referencia de interacciones rígidas y el sistema más realista de interacciones L-J 12:6.

### Praxis del método de Monte Carlo

Los programas de cálculo para efectuar simulaciones por el método MC necesitan enormes cantidades de tiempo de máquina y considerables volúmenes de memoria interna, lo que obliga a extremar la optimización de éstos, tanto desde el punto de vista computacional como de la consideración del problema físico en sí.

Para lo primero existen unos criterios fijos y especificados por la naturaleza del ordenador a emplear, y que no son difíciles de aplicar, siendo desde el segundo punto de vista desde donde se puede lograr una optimización más efectiva.

En la consideración del problema físico hay que tener en cuenta multitud de factores tales como el tipo de potencial a emplear, posibles simetrías en las moléculas, propiedades objeto de cálculo e incluso la densidad del sistema. Ocurre, por ejemplo, que aún para el cálculo de una misma propiedad, con un mismo modelo de potencial en las mismas moléculas, al variar la densidad, hay que hacer sensibles modificaciones en el programa de cálculo.

Esto hace que no existan programas standard para efectuar cálculos MC, siendo el primer paso y sin lugar a dudas la tarea más importante, la elaboración y puesta a punto de los programas de cálculo necesarios.

Sistematicamente para el cálculo de una determinada propiedad del sistema es indispensable, cuanto menos, el empleo de dos programas bien diferenciados.

El primero de ellos ha de establecer lo que se denominan las condiciones iniciales, y consiste en situar a las partículas dentro de una hipotética caja con un volumen adecuado para reproducir la densidad en que se está interesado y en las posiciones de los nudos de una determinada red cristalina, y generar una cadena de configuraciones suficientemente grande como para asegurar que la última configuración obtenida es independiente de la inicial; a este proceso se conoce como termalización, y se puede interpretar como la fusión de la red cristalina para dar lugar al líquido.

El segundo programa, partiendo de la última configuración de la termalización, genera a su vez una nueva cadena, calculando sobre las configuraciones de ésta los promedios necesarios para evaluar la magnitud en cuestión.

Para cadenas del mismo número de configuraciones, este segundo programa emplea una cantidad de tiempo que va desde el doble del consumido por el primero, hasta llegar a ser un orden de magni

tud superior, lo cual justifica plenamente no usar éste desde las condiciones iniciales.

## I.- MODELOS DEL POTENCIAL DURO DEL CS<sub>2</sub>

Este primer capítulo está dedicado a las simulaciones que hemos efectuado con un modelo de potencial duro para describir las moléculas del fluido. La importancia de los potenciales duros en la descripción de los líquidos poliatómicos se basa por una parte en la validez por sí mismos para explicar la estructura de determinados tipos de sistemas y por otra parte por constituir el sistema de referencia en algunas teorías de perturbaciones. Esto último se tratará en el capítulo tercero y en éste nos centraremos en su aplicabilidad al disulfuro de carbono líquido y al análisis de los aspectos teóricos relacionados con ello.

### 1.1.-El Modelo para el fluido

Conviene matizar en este punto que aunque el modelo elegido para las partículas es el tricéntrico de interacciones duras (HISM) que generalmente se expresa mediante las ecuaciones:

$$U_{\alpha\beta} \begin{cases} 0, & r_{\alpha\beta} > \sigma_{\alpha\beta} \\ \infty, & r_{\alpha\beta} < \sigma_{\alpha\beta} \end{cases} \quad (1.1)$$

y que simplemente definen un volumen excluido para la molécula y dan cuenta exclusivamente de las fuerzas repulsivas; resulta evidente que con sólo esta hipótesis para las partículas no sólo no se explica la estructura de un líquido, sino que ni siquiera se puede describir el comportamiento del estado líquido.

Esto obliga a realizar para el sistema una nueva hipótesis, que es suponer un volumen determinado a la muestra de partículas HISM, tal como establece Chandler en su revisión del estado líqui-

do<sup>19</sup>, con lo cual el modelo para el fluido es realmente el conjunto de estas dos hipótesis y no sólo las ecuaciones (1.1). Desde luego que en este modelo teórico la ordenación de moléculas se debe fundamentalmente a los efectos estéricos. Decimos en el modelo y no en el líquido real, y es aquí donde discrepamos con la idea, generalmente aceptada, de que en el líquido real la estructura viene determinada por las fuerzas repulsivas, ya que entre el modelo teórico y el líquido real existe una diferencia fundamental, que consiste en que mientras para el primero la densidad se impone como una hipótesis del modelo, para el líquido real es una consecuencia y precisamente una consecuencia de que entre las partículas que lo componen existen fuerzas atractivas. Incluso de las propias palabras de Chandler, principal defensor de la preponderancia en la estructura de un líquido de las fuerzas repulsivas, se deduce el papel fundamental que tienen las fuerzas atractivas en la estructura del fluido, ya que como él mismo dice, la misión de estas fuerzas atractivas es la de fijar la densidad, factor esencial para que las partículas se vean obligadas a adoptar una conformación determinada por efectos estéricos.

Aparte de esto, considerar que la única influencia de las fuerzas atractivas en la estructura del líquido real es a través de su efecto empaquetador de las moléculas es aún una visión muy simplificada y que está comprobado no siempre es una buena aproximación, ya que en determinados fluidos además de la mencionada influencia empaquetadora, que podríamos considerar indirecta, pero no por ello menos fundamental, aparece una acción directa en la correlación entre partículas via fuerzas atractivas, que analiza detalladamente el propio Chandler<sup>19</sup> cuando habla de las excepciones a la descripción de Van der Waals.

A la vista de estas consideraciones, parece razonable deshechar la idea de que el modelo teórico total constituido por las antedichas dos hipótesis, solo tenga en cuenta las acciones repulsivas, ya que establecer una densidad es dotar al modelo teórico

Fig.1.1 .- Orientación relativa de dos moléculas de disulfuro de carbono.

Fig.1.2 .- Mediante (x) se representan los valores obtenidos para  $\Psi_{\Delta r}/3N\Delta r$  en la simulación. Los puntos o pertenecen a la parábola ajustada con los puntos (x). La flecha  $\leftarrow$  indica el valor extrapolado con el ajuste de los puntos (x) a una recta y la flecha  $\rightarrow$  el punto de corte de la parábola . Los valores de la densidad son :

$$\rho_1 = 9.97 \times 10^{-3} \text{ g/\AA}^3$$

$$\rho_2 = 1.05 \times 10^{-2} \text{ g/\AA}^3$$

$$\rho_3 = 1.09 \times 10^{-2} \text{ g/\AA}^3$$



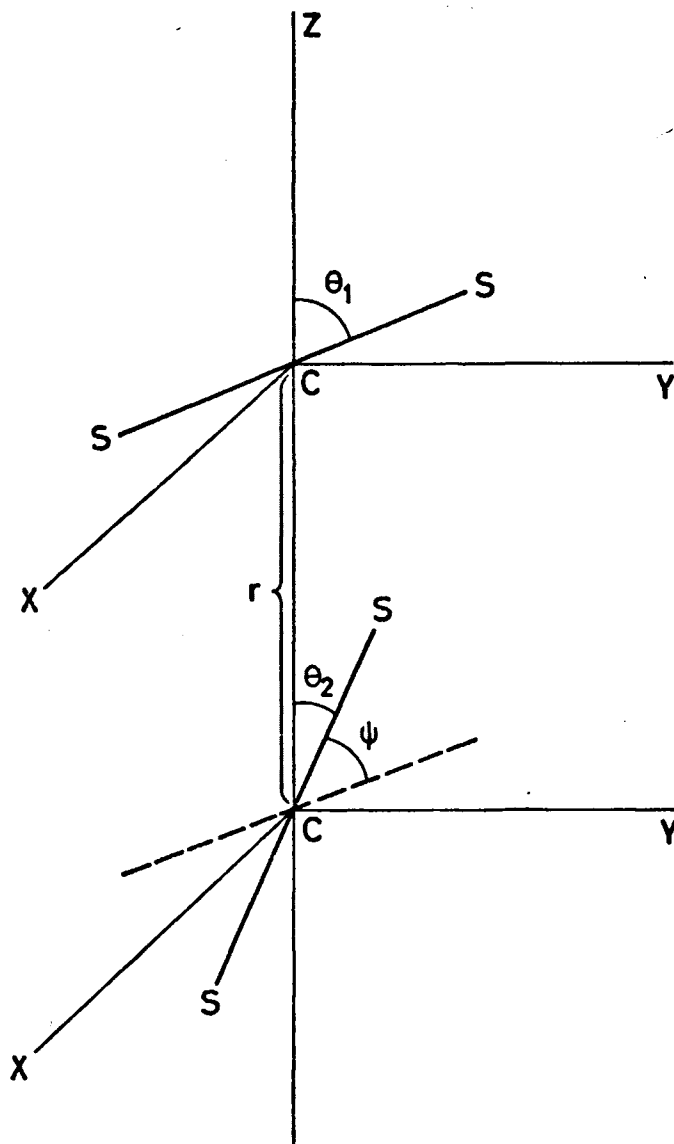


FIG. 1.1

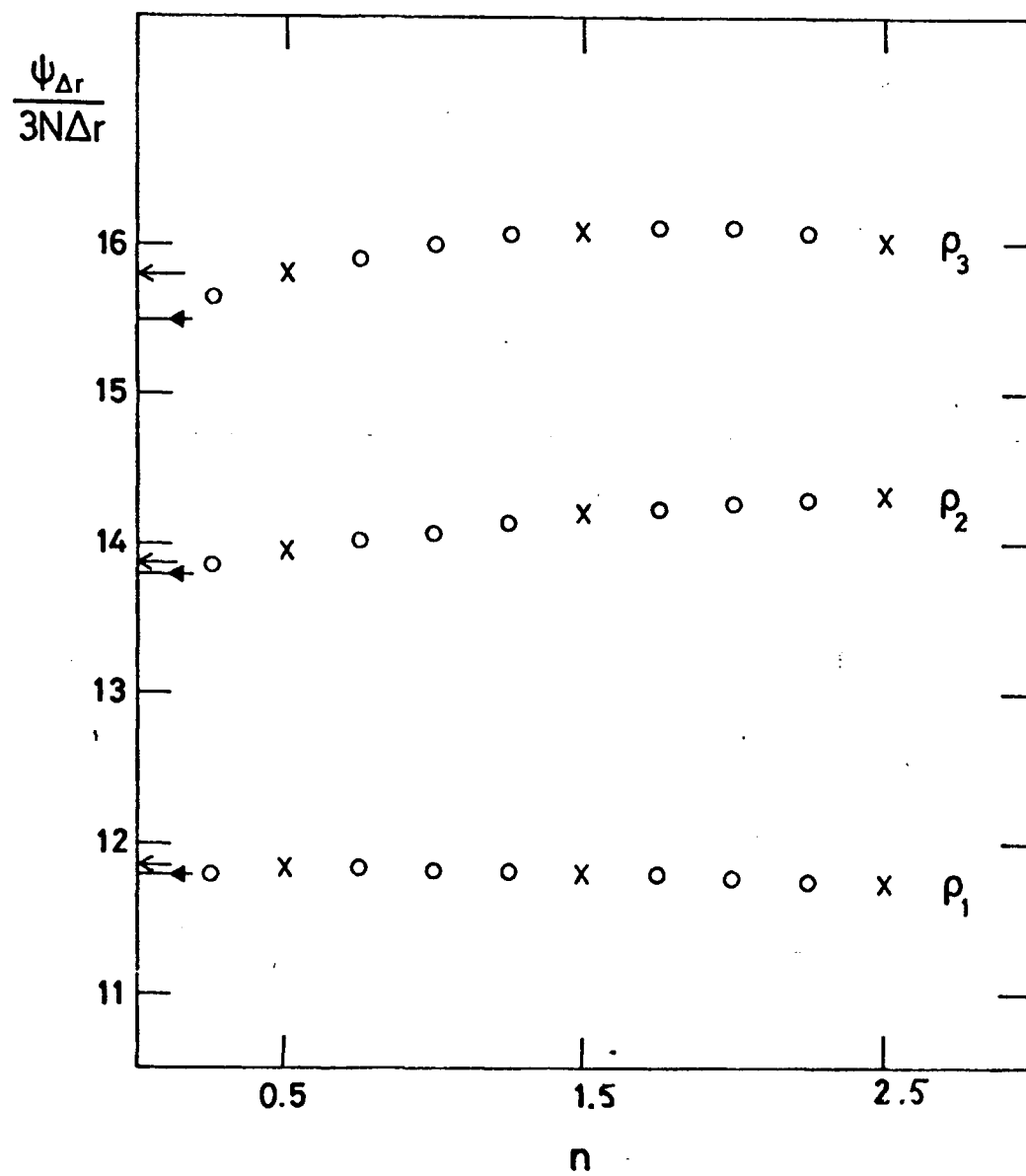


FIG. 1.2

de una propiedad del sistema real que en él es consecuencia de las acciones atractivas.

La concordancia entre la estructura de algunos líquidos reales y la obtenida a través del modelo teórico no es una razón lícita para inducir que en aquellos la estructura está dominada por las fuerzas repulsivas, en cuanto que el modelo contiene, aunque sea de forma indirecta, las acciones atractivas. Más bien habría que concluir que dado que el potencial HISM es una buena representación de las fuerzas repulsivas entre partículas, el hecho de que se obtenga acuerdo o no en la estructura real hay que atribuirlo a que la segunda hipótesis del modelo sea una buena o mala forma de tener en cuenta en el sistema teórico el efecto de las fuerzas atractivas que existen en el sistema real.

## 1.2.-Propiedades calculadas

Las magnitudes del sistema para las que hemos obtenido valores son las siguientes:

1.-Función de distribución radial de centros  $g_{\alpha\beta}$ . Estas se definen<sup>21</sup> como:

$$g_{\alpha\beta}(r) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{1}{\rho} \frac{M_{\alpha\beta}(r \pm \Delta r/2)}{4\pi r^2 \Delta r} \quad (1.2)$$

donde  $M_{\alpha\beta}(r \pm \Delta r/2)$  es el número de centros  $\beta$  que se encuentran a una distancia comprendida entre  $r - \Delta r/2$  y  $r + \Delta r/2$  de uno  $\alpha$ .

Para el  $CS_2$  existen tres de estas funciones:  $g_{CC}$ ,  $g_{SS}$  y  $g_{SC}$ .

2.-Función de distribución molecular  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$ . Todas las funciones termodinámicas del sistema se pueden expresar en función de ella. Para el  $CS_2$ , "r" representa la distancia

entre centros de masas, es decir, entre nucleos de carbono, y  $\Omega_1, \Omega_2$ , la orientación relativa de dos moléculas. A partir de la figura 1.1, vemos que las variables necesarias para especificar dicha orientación son  $\theta_1, \theta_2, \Delta\phi$ . Entre  $\Delta\phi$  y el ángulo  $\Psi$  que forman entre sí los ejes de dos moléculas existe la relación:

$$\cos\Psi = \cos\theta_1\cos\theta_2 + \sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\Delta\phi) \quad (1.3)$$

y los cálculos se han efectuado para  $g(r, \Omega_1, \Omega_2, \Psi)$  mediante una división en histogramas del campo de existencia de las variables. Para esta división hemos tomado los mismos intervalos que Cheung y Powles<sup>24</sup>, con lo cual la resolución para cada variable angular es  $\pm\pi/32$  en todos los casos, mientras que para  $r$  varía según el rango considerado para la distancia entre centros de masas, ya que siempre hemos tomado para esta variable 50 histogramas. Esta división da lugar a la matriz  $A_{rijk}$  con 54400 elementos, de los que sólo 13800 son independientes, por lo que la hemos transformado en la matriz  $B_{rs}$ , que contiene estos valores independientes, lo cual se traduce en un ahorro importante de la memoria de máquina necesaria para efectuar las simulaciones. La relación entre los índices de ambas matrices es:

$$r \equiv r$$

$$s = \sum_{l=1}^{(i-1)} \{(q-l)(2l+1)\} + (j-i)(2i+1) + k \quad (1.4)$$

Cuando  $i=0$ , entonces  $s=0$ .

$B_{rs}$  representa la variación de  $g(r, \theta_1, \theta_2, \Psi)$  con la distancia " $r$ " para cada una de las configuraciones " $s$ " a que da lugar la división en histogramas. Cuando nos refiramos con posterioridad a los histogramas, lo haremos por el valor medio de estos.

3.-Presión. Viene definida por:

$$P = \rho KT - \frac{\rho^2}{6V} \int g(r, \Omega_1, \Omega_2) r \frac{\partial U(r, \Omega_1, \Omega_2)}{\partial r} d\vec{r} d\Omega_1 d\Omega_2$$

A partir de la definición de las funciones de distribución radial  $g_{\alpha\beta}$  y su relación con  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$ , se llega fácilmente<sup>36,37</sup> a la expresión:

$$\frac{P}{\rho KT} = 1 + \frac{2}{3} \pi \rho \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}^2 g_{\alpha\beta}^* <(\vec{v}_{\alpha\beta} \vec{R}_{12})^*> \quad (1.5)$$

donde  $<>$  significa el valor promedio y el asterisco indica que se trata del valor de la función cuando  $r_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}$ .  $\vec{v}_{\alpha\beta}$  es un vector unitario en la dirección que une los centros  $\alpha$  y  $\beta$ . Sustituyendo la ecuación (1.2) en la (1.5) se obtiene:

$$\frac{P}{\rho KT} = 1 + \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{2\pi\rho}{3.4.\pi\rho.\Delta r} \sum_{\alpha\beta} M_{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta} \pm \Delta r/2) <(\vec{v}_{\alpha\beta} \vec{R}_{12})^*> \quad (1.6)$$

Como

$$<(\vec{v}_{\alpha\beta} \vec{R}_{12})^*> = \frac{\sum_N (\vec{v}_{\alpha\beta} \vec{R}_{12})^*}{M_{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta} \pm \Delta r/2)}, \text{ entonces,}$$

$$\frac{P}{\rho KT} = 1 + \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{1}{6\Delta r} \sum_{\alpha\beta} \sum_N (\vec{v}_{\alpha\beta} \vec{R}_{12})^* \quad (1.7)$$

En la simulación nosotros calculamos lo que llamamos función de contacto  $\Gamma$

$$\Gamma = \frac{2\Psi}{N}, \text{ donde } \Psi = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \Psi_{\Delta r} \text{ siendo:}$$

$$\Psi_{\Delta r} = \left\{ \sum_{i < j} \left( \sum_{\alpha\beta} (\vec{v}_{\alpha\beta} \vec{R}_{12})^* \right) \right\}_{\Delta r} \quad (1.8)$$

luego

$$\frac{P}{\rho KT} = 1 + \frac{1}{3N} \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \left( \frac{\Psi_{\Delta r}}{\Delta r} \right) \quad (1.9)$$

El límite se obtiene por extrapolación de  $\Psi_{\Delta r}/\Delta r$ , para lo cual se realiza el cálculo de  $\Psi_{\Delta r}$  en tres cortezas esféricas, sucesivas y a partir de  $\sigma_{\alpha\beta}$ , centradas en los centros  $\alpha$  ó  $\beta$  y de espesor  $\Delta r = 0.0025\text{\AA}$

La extrapolación se ha hecho por ajuste de los puntos a una recta y a una parábola, obteniéndose valores que se diferencian menos que el error que acompaña a los datos, - por lo que hemos tomado sistemáticamente el resultado proveniente del ajuste por mínimos cuadrados a una recta. En este sentido el caso tricéntrico se comporta de forma análoga al dicéntrico, muy bien estudiado por Tildesley y Streett<sup>38</sup>, y para el cual los datos se encuentran sensiblemente alineados.

En la fig.1.2 se muestran las comparaciones entre los ajustes parabólicos y rectilíneos con los datos obtenidos a las densidades  $9.97 \times 10^{-3}$ ,  $1.05 \times 10^{-2}$  y  $1.09 \times 10^{-2} \rho/\text{\AA}^3$ . Sólo para la densidad más alta la discrepancia es del orden del error estimado en los resultados, si bien esta diferencia pudiera deberse a que a densidades superiores es necesaria una simulación de cadena más larga.

4.- Factor de estructura. La función  $S(K)$  de scattering coherente estático<sup>30</sup> se puede descomponer en:

$$S(K) = S_s(K) + S_m(K) + S_d(K) \quad (1.10)$$

donde  $S_s(K)$  es la contribución individual de los núcleos,  $S_m(K)$  es la debida a núcleos en una misma molécula, y  $S_d(K)$  la contribución de átomos en moléculas diferentes y es la que contiene información sobre la correlación espacial entre pares de átomos en moléculas diferentes.

Se define el factor de estructura  $H(K)$  como<sup>39</sup>:

$$H(K) = \{S_m(K) + S_d(K)\} / S_s(K) = H_m(K) + H_d(K) \quad (1.11)$$

$H_d(K)$  tiende a cero mucho más deprisa que  $H_m(K)$ , por lo que, a partir de un determinado valor de  $K$ ,  $H(K) \approx H_m(K)$ , lo que permite determinar las constantes que aparecen en la expresión de  $H_m(K)$ , y reconstruir ésta en todo el rango de  $K$  por lo que a continuación se puede deducir  $H_d(K)$ .

Como se ha dicho, es  $H_d(K)$  quien contiene la información sobre la correlación entre centros y se encuentra relacionada con las funciones de distribución a través de la expresión:

$$H_d(K) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} h_{\alpha\beta}(K) S_{\alpha} S_{\beta} \quad (1.12)$$

siendo:

$$h_{\alpha\beta}(K) = \frac{4\pi\rho}{K} \left\{ \int_{\sigma_{\alpha\beta}}^{\infty} (g_{\alpha\beta}-1)r \cdot \sin Kr dr - \sigma_{\alpha\beta}^2 j_1(K\sigma_{\alpha\beta}) \right\} \quad (1.13)$$

y  $j_1(x)$  la función esférica de Bessel de orden uno<sup>40</sup>.

Con los valores dados para los coeficientes  $S_{\alpha}$  y  $S_{\beta}$  por Sandler y Narten<sup>30</sup>, la ecuación (1.12) toma la forma:

Para Rayos X:

$$H_d(K) = 0.03h_{cc}(K) + 0.26h_{cs}(K) + 0.71h_{ss}(K) \quad (1.14)$$

Para Neutrones:

$$H_d(K) = 0.29h_{cc}(K) + 0.50h_{cs}(K) + 0.21h_{ss}(K) \quad (1.15)$$

En la integral de la ecuación (1.13) el límite superior in finito se ha sustituido por un valor  $r_c$  tal que  $g_{\alpha\beta}(r > r_c) \approx 1$ . Para  $r_c$  se han tomado valores entre  $3.25\sigma$  y  $4.05\sigma$ , con lo cual  $H_d(K)$  sólo se ve afectado por la mencionada sustitución para valores de  $K$  inferiores a  $1 \text{ \AA}^{-1}$ .

La integral ha sido evaluada numéricamente por el método de Filon<sup>40</sup>, empleando un intervalo de integración de 0.025σ en todos los casos.

### 1.3.- Control del método

Para efectuar las simulaciones se ha elaborado un programa de cálculo que se describe en el Apéndice A. Este programa genera la cadena de configuraciones por un método de estados independientes<sup>42</sup> en el que todas las configuraciones aceptadas tienen el mismo peso estadístico. El promedio de las magnitudes calculadas se realiza - mediante un muestreo en que se toma una configuración de cada M - configuraciones aceptadas, y en ellas se extienden los promedios a todas las partículas; para M se han tomado valores próximos al número de partículas. Este método difiere del clasicamente utilizado<sup>29</sup> de promediar todas las configuraciones pero cada vez sólo sobre una sola partícula. Al ser  $M=N$  el número de promedios efectuados en total por ambos métodos es el mismo para igual número de ciclos, pero por tratarse de un muestreo de estados independientes, nuestro método es, al menos formalmente, más correcto y evita posibles estados metaestables en los que se puede caer al centrar los cálculos en una sola molécula.

La primera simulación efectuada ha sido para analizar el número de ciclos y de partículas necesarios para alcanzar la precisión necesaria en los resultados obtenidos. Para esto tomamos a la densidad de  $9.97 \times 10^{-3} \rho/\text{\AA}^3$  (correspondiente al  $\text{CS}_2$  a temperatura ambiente y 1 atmósfera de presión), 216 partículas, que para un potencial de tan corto alcance como es el modelo duro, son suficientes con toda seguridad, y tomamos como parámetros de potencial los mismos empleados por Chandler<sup>16</sup> en el estudio del disulfuro de carbono por la teoría RISM. Para termalizar el sistema empleamos - 500000 configuraciones cuando trabajamos con 125 partículas y -



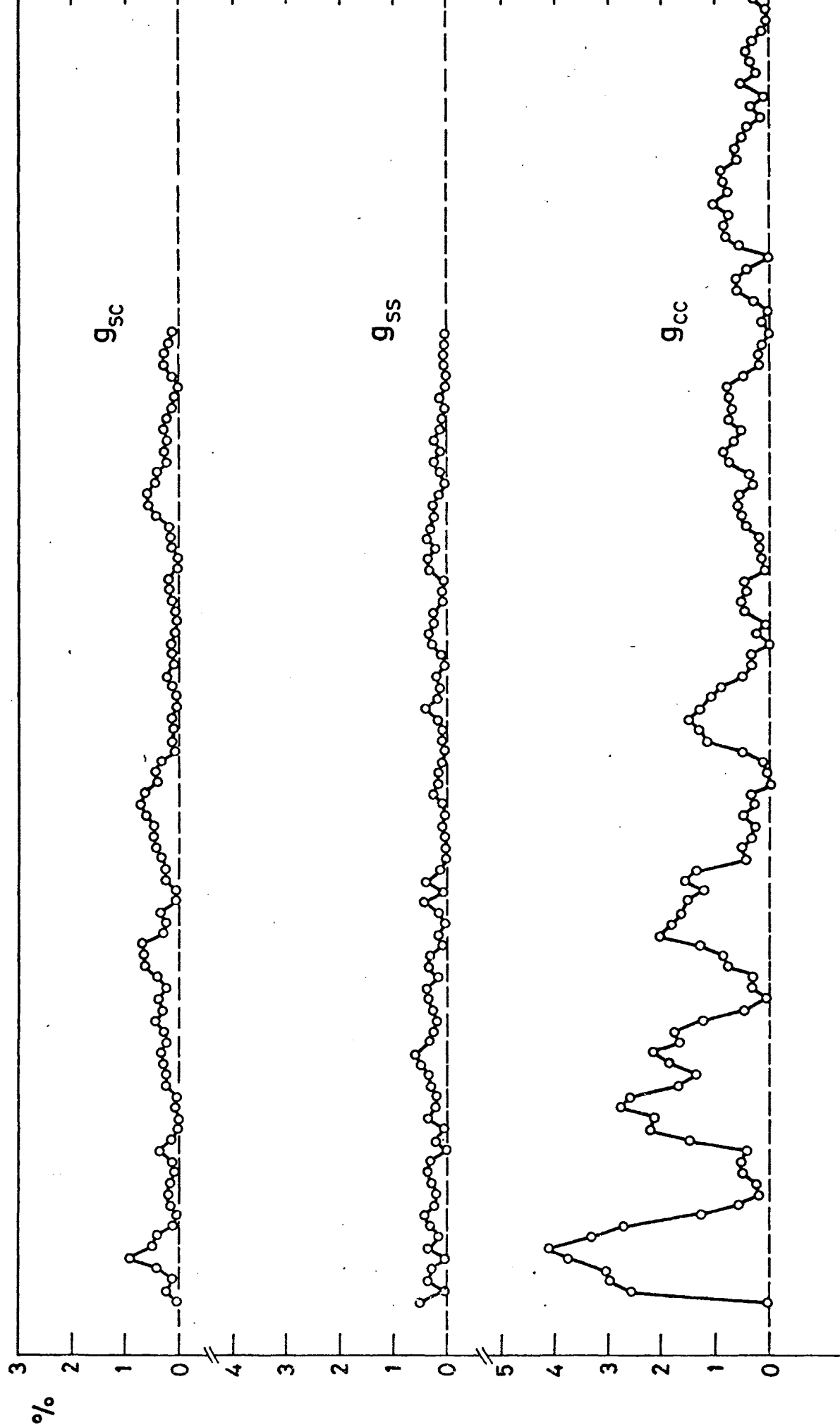
600000 configuraciones en el caso que sean 216 partículas.

Una vez termalizado el sistema comenzamos el cálculo de las funciones de distribución radial centro-centro y de la presión en función del número de ciclos generados. En la fig.1.3 se representa el valor absoluto de las diferencias en % entre las funciones obtenidas a  $0.8 \times 10^6$  ciclos y a  $1.2 \times 10^6$  ciclos. Se observa que en el caso de  $g_{ss}$  las discrepancias no superan el 0.5% y para la  $g_{sc}$  un 90% de los puntos no superan tampoco ese valor, no llegándose en ningún caso al 1%. En cuanto a la función  $g_{cc}$ , ésta presenta mayores diferencias; no obstante para el 80% de los valores no se llega al 1%, y sólo un 11% de dichos valores superan el 2%, no rebasándose el 4% más que en un caso. Esta diferencia de comportamiento en la función de distribución radial de carbonos respecto a las otras dos se debe a que en la interacción entre dos moléculas hay que considerar 9 interacciones entre centros, de las cuales 4 son del tipo SS, otras 4 SC y sólo una CC; por tanto los promedios para obtener  $g_{ss}$  o  $g_{sc}$  se efectúan sobre una muestra cuatro veces mayor a la utilizada para  $g_{cc}$ . Asimismo, puesto que el número de moléculas que rodean a una dada crece con la distancia, cuanto mayor es ésta más amplia es la estadística y las discrepancias en  $g_{cc}$  disminuyen. De todas formas, la misma razón que produce las discrepancias en  $g_{cc}$  indica que las interacciones C-C son las que menos contribuyen a las propiedades del sistema y por tanto los errores que acompañen al cálculo de aquellas pesarán también menos en el cálculo de éstas.

De todo esto se deduce que una simulación con 216 partículas extendida hasta  $0.8 \times 10^6$  ciclos es suficiente para obtener las funciones de distribución radial con un error no superior al 1%.

Una segunda simulación se efectuó a la misma densidad y con los mismos parámetros de potencial pero con 125 partículas. Las funciones de distribución obtenidas después de  $0.3 \times 10^6$  ciclos aparecen en las figuras 1.4, 1.5 y 1.6, junto a las obtenidas con 216

Fig.1.3.- Diferencias porcentuales entre las funciones de distribución radial obtenidas a  $0.8 \times 10^6$  y  $1.2 \times 10^6$  ciclos para el  $\text{CS}_2$  con 216 partículas  $\sigma_{ss} = \sigma_{cc} = \sigma_{sc} = 3.4 \text{ \AA}$ , a la densidad  $\rho = 9.97 \times 10^{-3} \rho/\text{\AA}^3$ .



$r$  ( $\text{\AA}$ )

FIG. 1.3

Fig.1.4, 1.5 y 1.6.- Mediante línea continua se representan las correspondientes funciones de distribución radial entre centros obtenidas con 125 partículas y durante  $0.3 \times 10^6$  ciclos. Los puntos o son los obtenidos con 216 partículas y  $1.2 \times 10^6$  ciclos. En ambos casos  $\rho = 9.97 \times 10^{-3} \text{ } \rho/\text{\AA}$  y  $\sigma_{ss} = \sigma_{cc} = \sigma_{sc} = 3.4 \text{ \AA}$

Fig.1.7.- Los puntos (x) representan los valores obtenidos para  $\Psi_{\Delta r}/3N\Delta r$  en tres puntos de la cadena: a 400000, 1,200000 y 2,000000 ciclos.

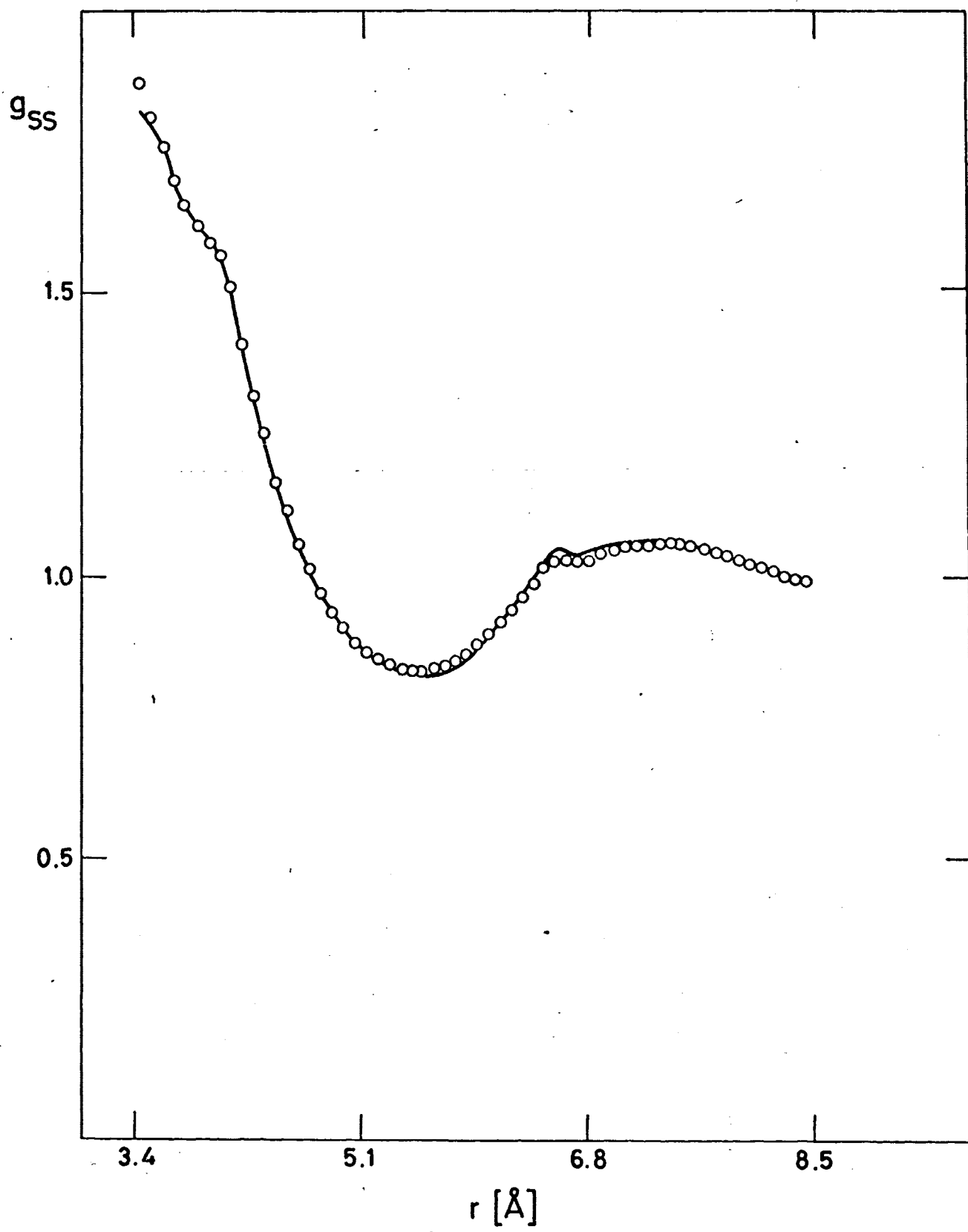


FIG. 1.4

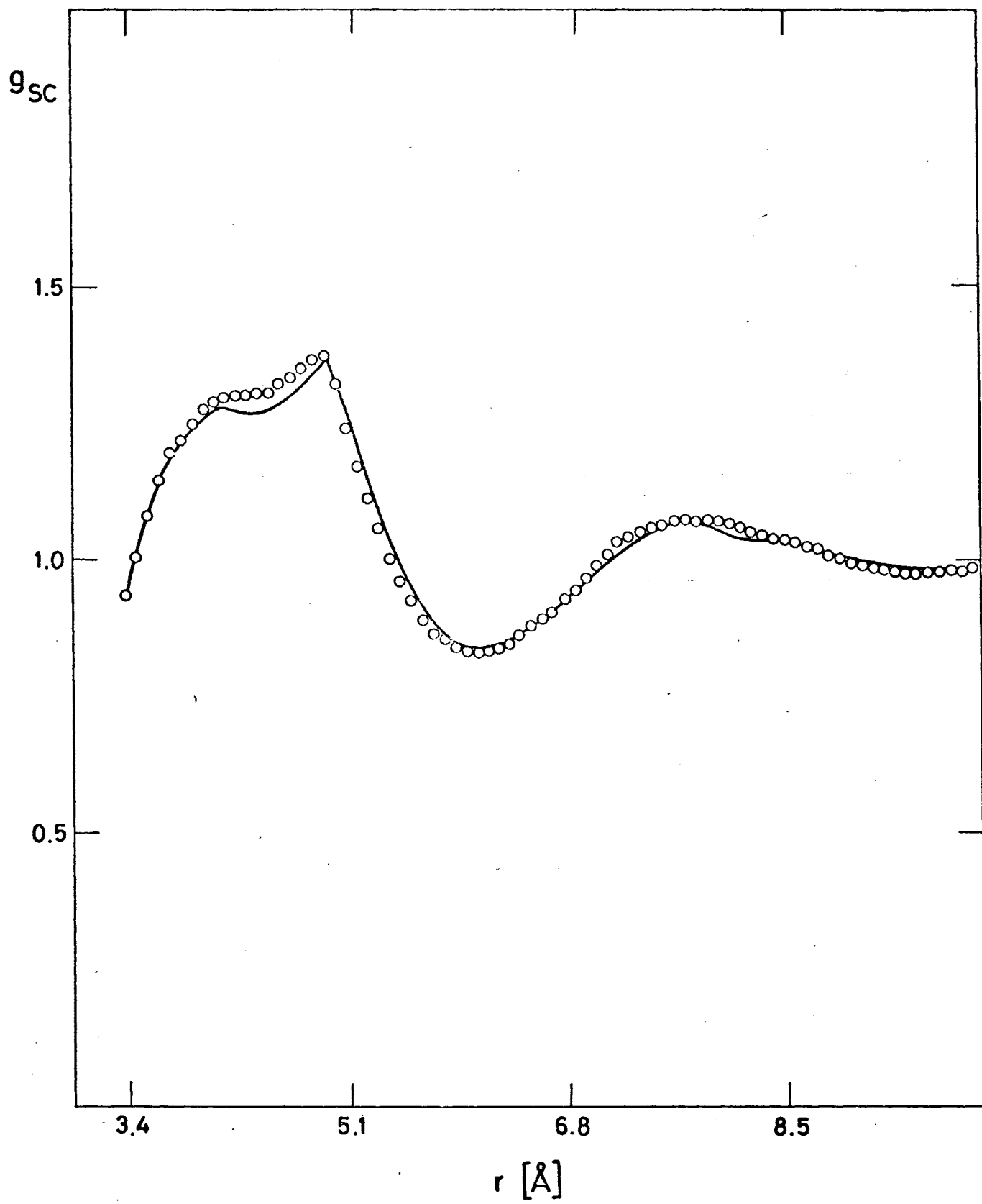


FIG. 1.5

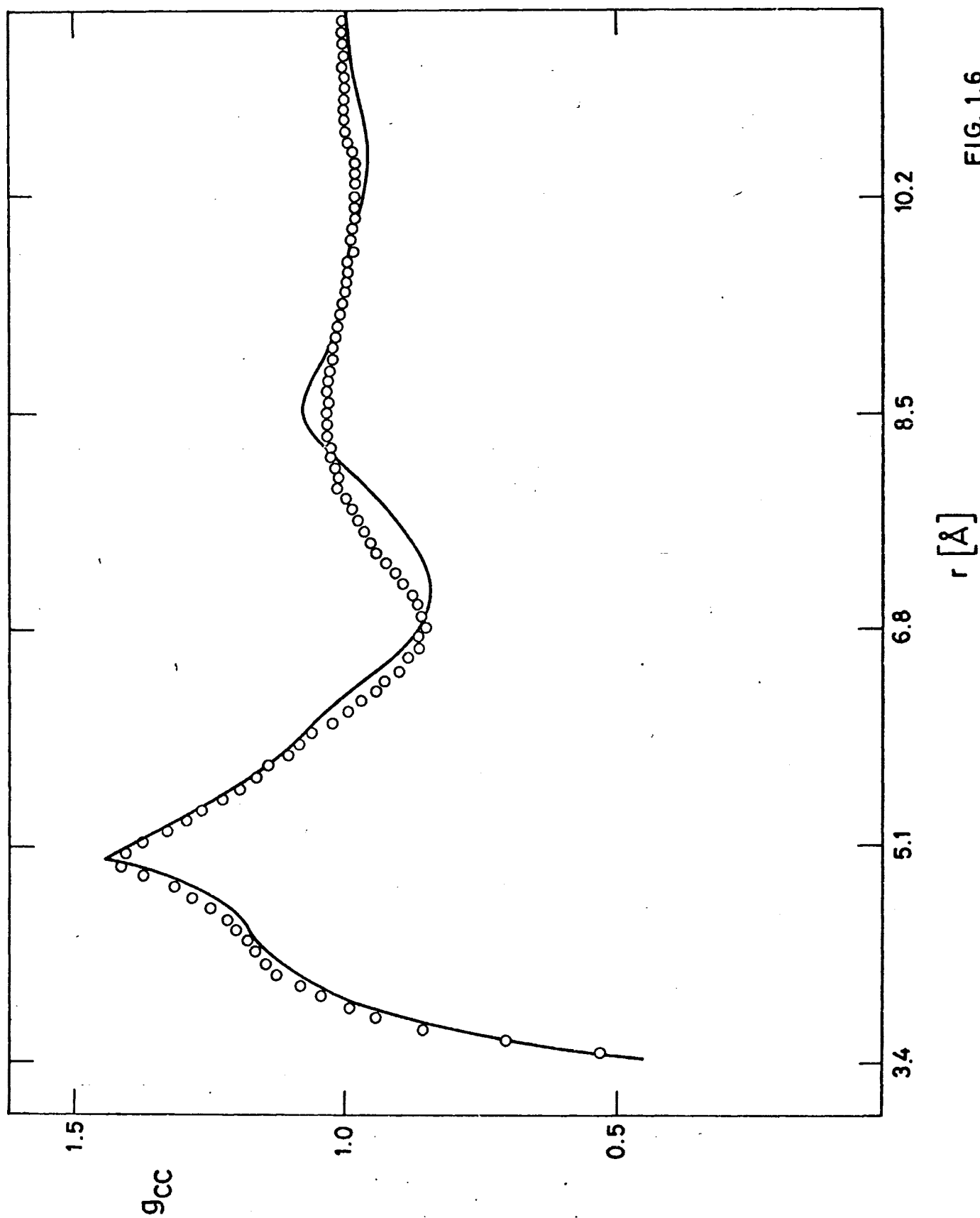


FIG. 1.6

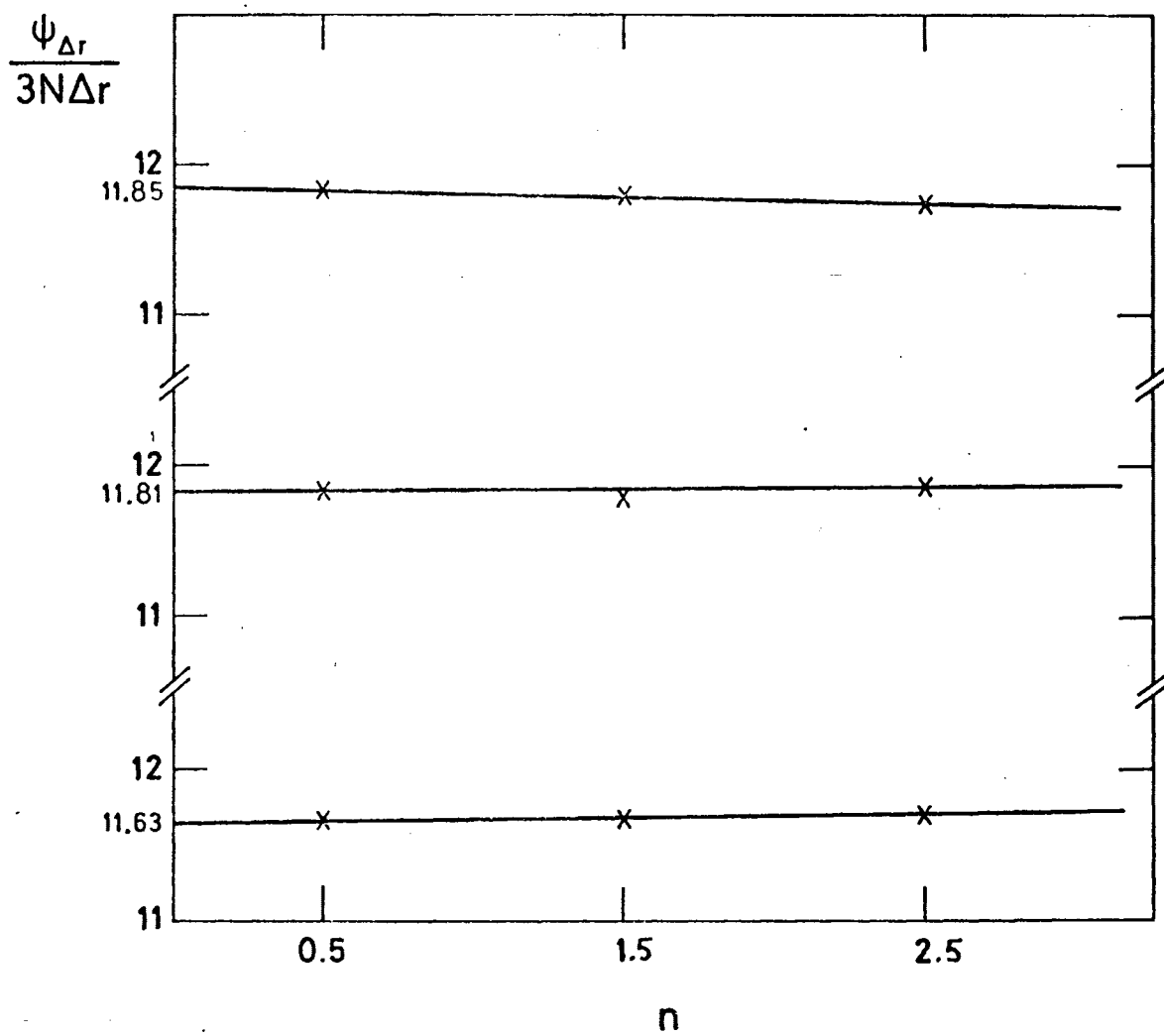


FIG. 1.7



partículas y  $1.2 \times 10^6$  ciclos. Si bien existen discrepancias, que vuelven a ser máximas para las funciones  $g_{cc}$ , la estructura de las funciones, incluida la que podíamos llamar estructura fina, consistente en hombros y picos secundarios, es la correcta, por lo que el análisis estructural del líquido se puede hacer de esta simulación que, evidentemente, es mucho menos costosa de realizar.

En cuanto al valor de la presión, en la figura 1.7, aparecen los valores de  $\Psi_{Ar}$  en función de la longitud de la cadena para el caso de 216 partículas. Se observa que para esta propiedad es necesario llegar hasta los  $2 \times 10^6$  ciclos para obtener imprecisiones inferiores al 1%.

Luego las conclusiones a que hemos llegado de este chequeo son que los cálculos de la presión debemos efectuarlos con 216 partículas y alrededor de  $2 \times 10^6$  ciclos, mientras que el análisis estructural del líquido solo requiere 125 partículas y unos  $0.3 \times 10^6$  ciclos cuando no sea necesario extender las funciones de distribución más allá de los  $2.5\sigma$ . Para mayores distancias es necesario emplear 216 partículas y unos  $0.8 \times 10^6$  ciclos.

#### 1.4.-Casos estudiados

En todas las simulaciones efectuadas con el modelo de potencial duro de tres centros para las partículas hemos considerado a dichos centros alineados y sobre los núcleos de los átomos que forman la molécula, es decir, separados los extremos del interior en  $1.55 \text{ \AA}$ , que es la distancia de enlace en el  $\text{CS}_2$ .

Las características de cada una de las simulaciones se recogen en la Tabla 1.1, junto a una numeración que las identifica y que en lo sucesivo emplearemos para referirnos a ellas.

Tabla 1.1.- Casos estudiados con modelo de potencial duro.

	Número Partículas	Densidad	$d_{ss}$	$d_{cc}$	$d_{sc}$	T
I	125	$8.5 \times 10^{-3}$	3.4	3.4	3.4	282.16°K
II	125	$9.97 \times 10^{-3}$	3.4	3.4	3.4	
III	216	$9.97 \times 10^{-3}$	3.4	3.4	3.4	
IV	216	$1.05 \times 10^{-2}$	3.4	3.4	3.4	
V	216	$1.09 \times 10^{-2}$	3.4	3.4	3.4	
VI	125	$1.17 \times 10^{-2}$	3.4	3.4	3.4	
VII	125	$9.97 \times 10^{-3}$	3.3884	3.5249	3.6623	
VIII	125	$9.97 \times 10^{-3}$	3.447	3.760	3.604	

En los casos I al VI inclusive, los parámetros del potencial  $\sigma_{\alpha\beta}$  los hemos tomado de Lowden y Chandler<sup>16</sup>.

Para el caso VII, teniendo en cuenta las sugerencias de Hsu y otros<sup>43</sup> y los resultados obtenidos en cuanto a la localización del primer pico de las funciones de distribución radial por R. Agrawal y otros<sup>44</sup>, hemos calculado los parámetros  $\sigma_{\alpha\beta}$  a partir de los parámetros del potencial L-J (12:6), usado por Steinhauser<sup>35</sup> para el disulfuro de carbono, por medio de la expresión:

$$d_{\alpha\beta} = \int_0^{\infty} \{1 - \exp(-\phi_{\alpha\beta} R(r)/KT)\} dr \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} \text{donde} \quad \phi_{\alpha\beta} R(r) = & \epsilon_{\alpha\beta} + 4\epsilon_{\alpha\beta} |(\sigma_{\alpha\beta}/r)^{12} - (\sigma_{\alpha\beta}/r)^6|, \quad r < 2^{1/6} \sigma_{\alpha\beta} \\ & 0, \quad r > 2^{1/6} \sigma_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (1.17)$$

siendo  $\sigma_{\alpha\beta}$ ,  $\epsilon_{\alpha\beta}$  los parámetros de L-J y  $d_{\alpha\beta}$  el diámetro efectivo para la esfera rígida que representa la interacción  $\alpha\beta$ .

Para una temperatura de 282.16°K, los valores obtenidos son los de la Tabla 1.1, en donde  $d_{sc}$  no corresponde a la media de los  $d_{ss}$  y  $d_{cc}$ , y por tanto el modelo de potencial no es el resultado de la fusión de tres esferas, sino que puede considerarse como si el átomo central tuviese diferente diámetro efectivo frente a un átomo extremo que frente a otro central.

En el caso VIII hemos empleado para los parámetros del potencial una modificación de los del caso anterior, para obtener un modelo que sí corresponde a tres esferas fusionadas. El criterio de modificación que hemos seguido ha sido que las desviaciones de los parámetros modificados respecto a los originales sean inversamente proporcionales al número de pares de interacción que de cada tipo aparecen entre cada dos moléculas (cuatro SS, cuatro SC y una CC).

En la figura 1.8, aparecen dibujadas las moléculas que resultan con los diferentes parámetros de potencial.

Fig.1.8.- Tamaño efectivo de las moléculas según los diferentes parámetros del potencial

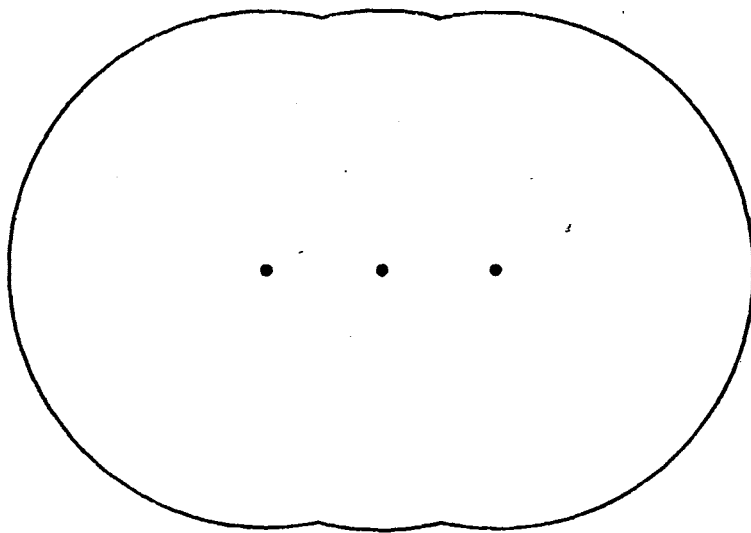
$$\text{I) } d_{cc} = d_{ss} = d_{sc} = 3.4 \text{ \AA}$$

$$\text{VII) } d_{ss} = 3.3884 \text{ \AA}; d_{cc} = 3.5249 \text{ \AA};$$

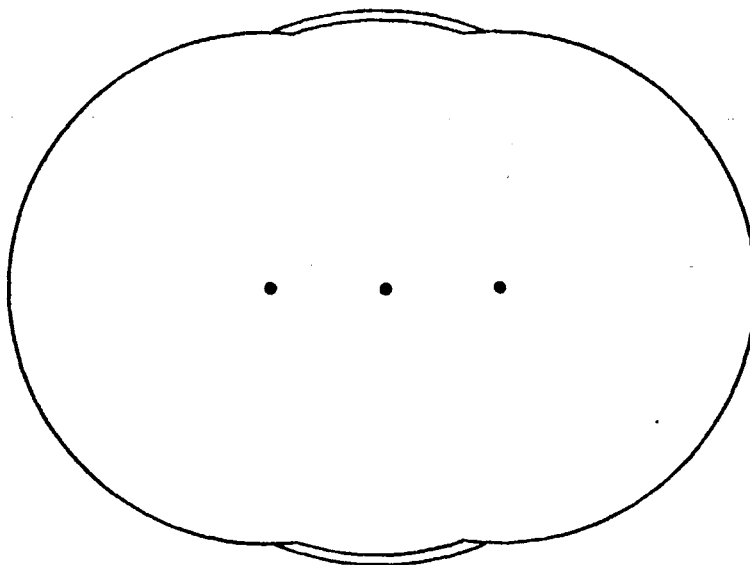
$$d_{sc} = 3.6623 \text{ \AA}$$

$$\text{VIII) } d_{ss} = 3.447 \text{ \AA}; d_{cc} = 3.760 \text{ \AA};$$

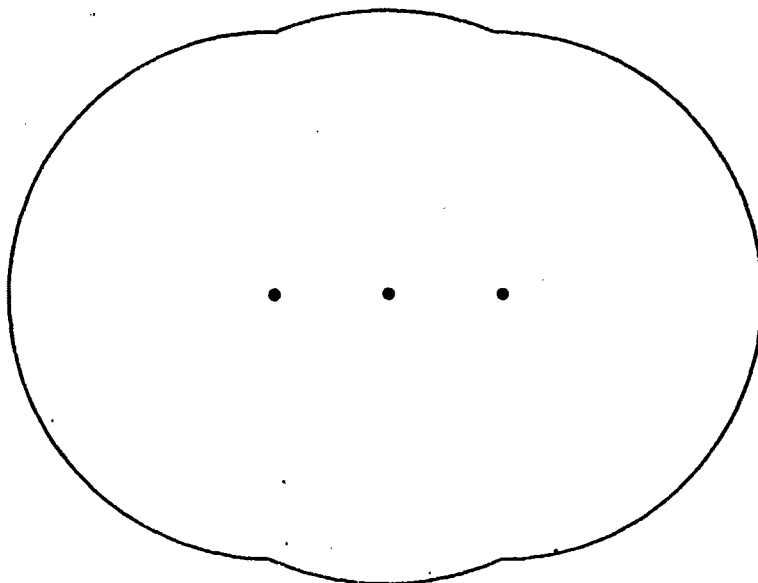
$$d_{sc} = 3.604 \text{ \AA}$$



I



VII



VIII

FIG. 1.8

### 1.5.- Funciones de distribución radial entre centros

Las funciones obtenidas para los casos III, VII y VIII, aparecen en las figuras 1.9, 1.10 y 1.11 respectivamente. De la comparación de estas funciones con las obtenidas por Steinhauser<sup>35</sup> mediante DM, se observa en un principio que las funciones  $g_{ss}$  y  $g_{sc}$  de los casos VII y VIII difieren significativamente de las análogas de DM, mientras que las del caso III están en razonable concordancia. Para la función  $g_{cc}$  los tres casos se apartan sensiblemente, si bien al contrario de lo que ocurriría antes son las funciones de los casos VIII y en concreto el VII las que se acercan más. No obstante, es el caso III el que sin lugar a dudas se ajusta más de una forma global a los resultados de DM. Encontramos, por tanto, que paradójicamente los parámetros de potencial que se han obtenido a partir de los utilizados por Steinhauser son los que conducen a resultados más discordantes. Pero esto puede explicarse si tenemos en cuenta que la ecuación (1.16) propuesta por Hsu considera cada centro independiente de los demás, lo cual claramente no es correcto en este caso en que las interacciones S-S están descritas por un parámetro de potencial  $\epsilon_{ss}$  un orden de magnitud superior a los correspondientes  $\epsilon_{sc}$  y  $\epsilon_{cc}$ . Esto hace que las influencias que sufre una interacción C-C o S-C entre dos moléculas a través de las interacciones S-S que aparecen entre este mismo par de moléculas, sean incluso superiores a las debidas a la energía cinética térmica de dichas partículas y que son las únicas consideradas en (1.16).

Un método más realista de estimar los parámetros del potencial rígido efectivo es considerar las superficies de energía potencial de la molécula como un todo y sobre ellas analizar la influencia de la energía cinética media de las partículas a una temperatura dada. Aunque para obtener dichas superficies de energía es preciso tener en cuenta las interacciones entre los seis cen-

Fig.1.9.- Funciones de distribución radial a  $\rho = 9.97 \times 10^{-3} \rho/\text{\AA}^3$ , con  $d_{ss}=d_{cc}=d_{sc}=3.4 \text{\AA}$ . Caso III.

Fig.1.10.- Funciones de distribución radial a  $\rho = 9.97 \times 10^{-3} \rho/\text{\AA}$ , con  $d_{ss}=3.3884 \text{\AA}$ ;  $d_{cc}=3.5249 \text{\AA}$ ;  $d_{sc}=3.6623 \text{\AA}$ . Caso VII.

Fig.1.11.- Funciones de distribución radial a  $\rho = 9.97 \times 10^{-3} \rho/\text{\AA}$ , con  $d_{ss}=3.447 \text{\AA}$ ;  $d_{cc}=3.760 \text{\AA}$ ;  $d_{sc}=3.604 \text{\AA}$ . Caso VIII.

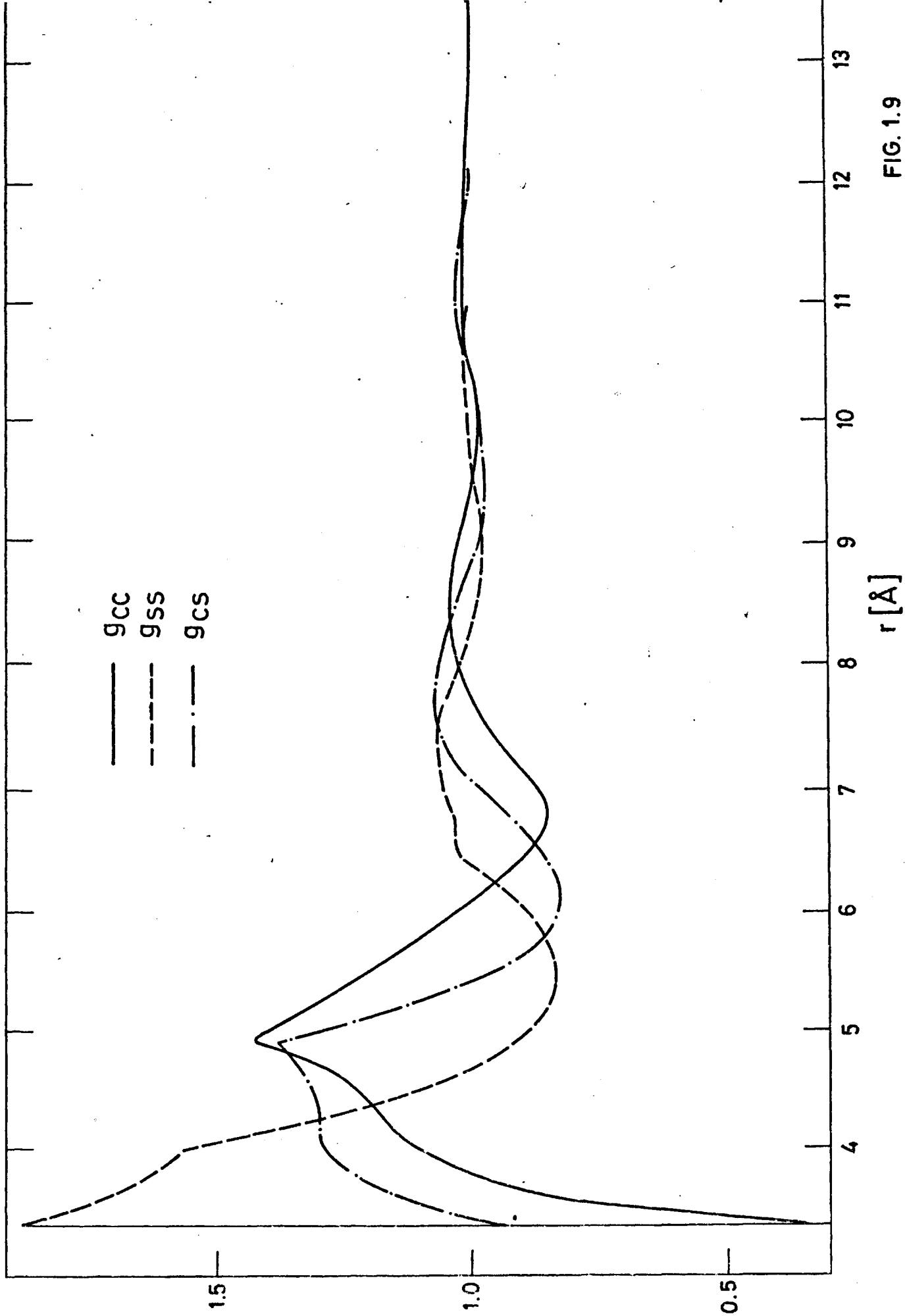


FIG. 1.9



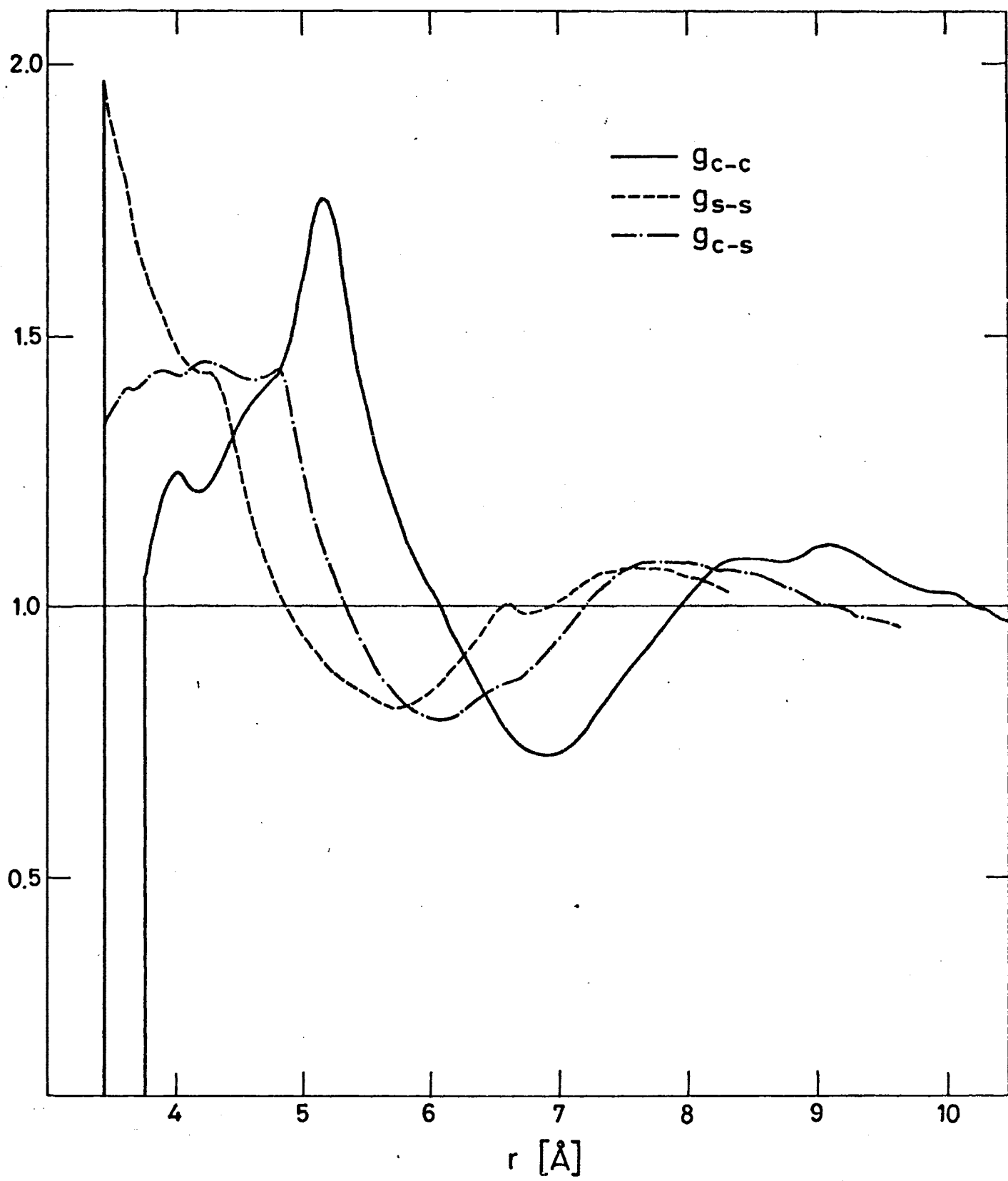


FIG. 1.10

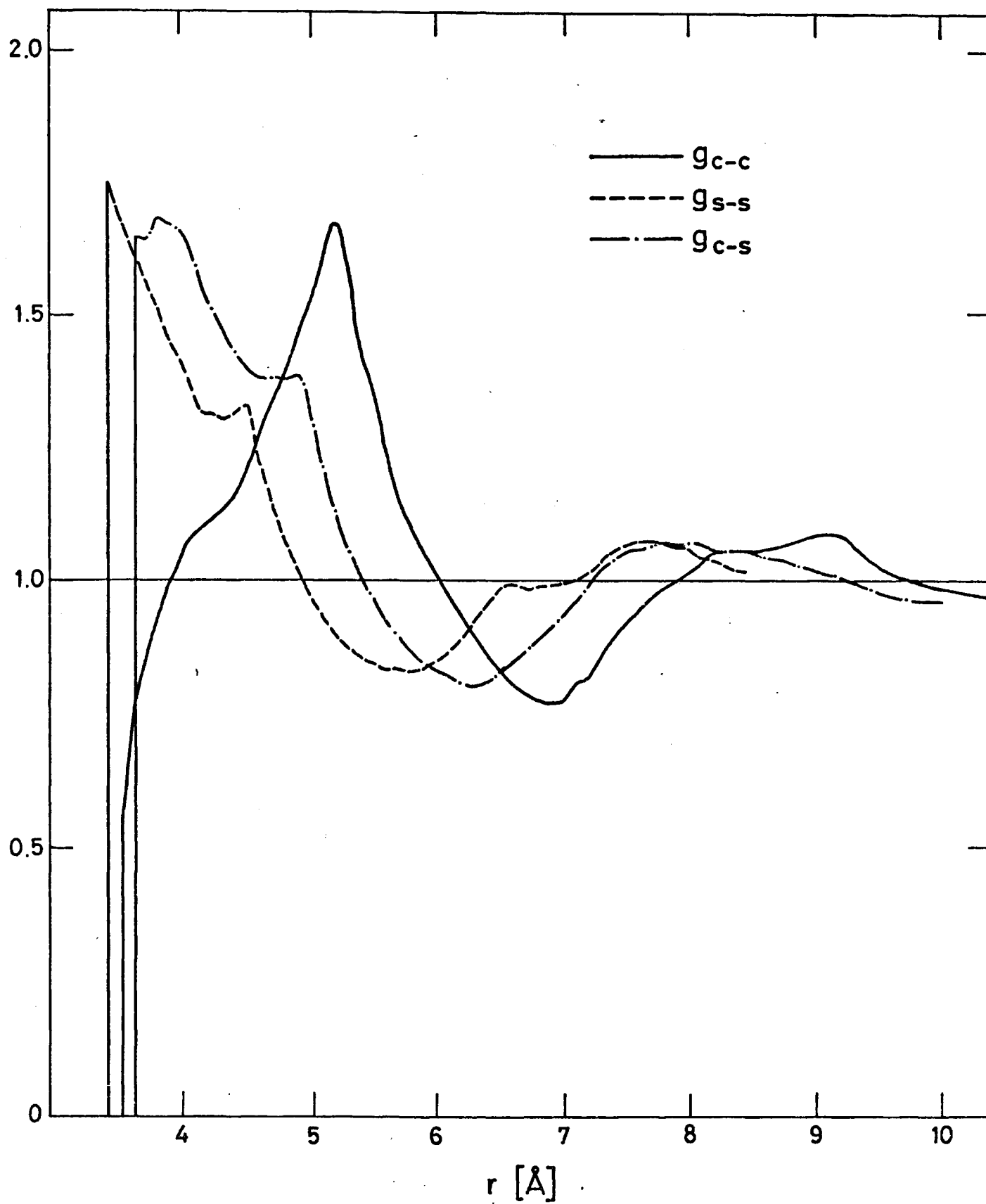


FIG. 1.11

tros de dos moléculas, dado que las correspondientes a los centros S son francamente dominantes, se obtiene una buena representación de las mencionadas superficies mediante las curvas equipotenciales de la interacción de un centro S con los tres centros de una molécula. La única interacción que no viene reflejada en este esquema es la C-C, pero esta no es de gran importancia, ya que solo es una de las nueve que aparecen entre un par de moléculas, y está descrita por un parámetro de potencial  $\epsilon_{cc}$  muy inferior al  $\epsilon_{ss}$ . Dicha representación aparecen en la figura 1.12, y muestra que un modelo de esferas fusionadas con parámetros  $d_{sc} = d_{ss} = 3.4 \text{ \AA}$  realiza una buena descripción de la parte repulsiva de la molécula de  $\text{CS}_2$ , con los parámetros dados en la referencia 35, y de aquí la concordancia entre las funciones  $g_{sc}$  y  $g_{ss}$  obtenidas por nosotros y por DM.

En cuanto a la interacción C-C, realizar una representación análoga de las curvas equipotenciales de un centro C frente a una molécula, no es una buena aproximación, ya que se suprimen dos centros S de una gran influencia, pero no obstante permite un análisis cualitativo. En efecto, de la figura 1.13 puede predecirse que, muy probablemente, el valor adecuado para  $d_{cc}$  sera superior a  $3.4 \text{ \AA}$ , lo que concuerda con el hecho de que las funciones  $g_{cc}$  de los casos VII y VIII en los que esto ocurre, se ajustan mejor que las funciones del caso III.

Centrándonos en el caso III, vamos a comparar detalladamente las funciones en él obtenidas con las de DM<sup>35</sup> y las calculadas por Chandler<sup>16</sup> a través de la teoría RISM. Las nueve funciones aparecen en las figuras 1.14, 1.15 y 1.16. En líneas generales las curvas de los tres métodos tienen el mismo hábito. Como ya hemos adelantado las mayores diferencias se aprecian para la función  $g_{cc}$ . En cuanto a la  $g_{ss}$ , la concordancia de nuestros resultados con los de DM es completa a partir de los  $4 \text{ \AA}$ , cosa que no ocurre con la correspondiente función RISM. Respecto a las funciones  $g_{sc}$ , las diferencias entre ellas son menos notables, si bien nuestros resultados se encuentran más cercanos a los de Steinhauser que a los de

Fig.1.12.- Curvas de energía equipotencial para la interacción de un centro S con una molécula de  $\text{CS}_2$  utilizando un potencial L-J(12:6) con  $\sigma_{\text{SS}} = 3.3 \text{ \AA}$ ;  $\sigma_{\text{CS}} = 4.0 \text{ \AA}$ ;  $\epsilon_{\text{SS}} = 0.77 \text{ Kcal/mol}$  y  $\epsilon_{\text{CS}} = 0.06 \text{ Kcal/mol}$ . La línea de puntos representa el tamaño efectivo utilizado en el caso III.

Fig.1.13.- Curvas de energía equipotencial para la interacción de un centro C con una molécula de  $\text{CS}_2$  utilizando un potencial L-J (12:6) con  $\sigma_{\text{CS}} = 4.0 \text{ \AA}$ ;  $\sigma_{\text{CC}} = 3.85 \text{ \AA}$ ;  $\epsilon_{\text{CS}} = 0.06 \text{ Kcal/mol}$  y  $\epsilon_{\text{CC}} = 0.06 \text{ Kcal/mol}$ . La línea de puntos corresponde a un diámetro efectivo de  $3.4 \text{ \AA}$ .

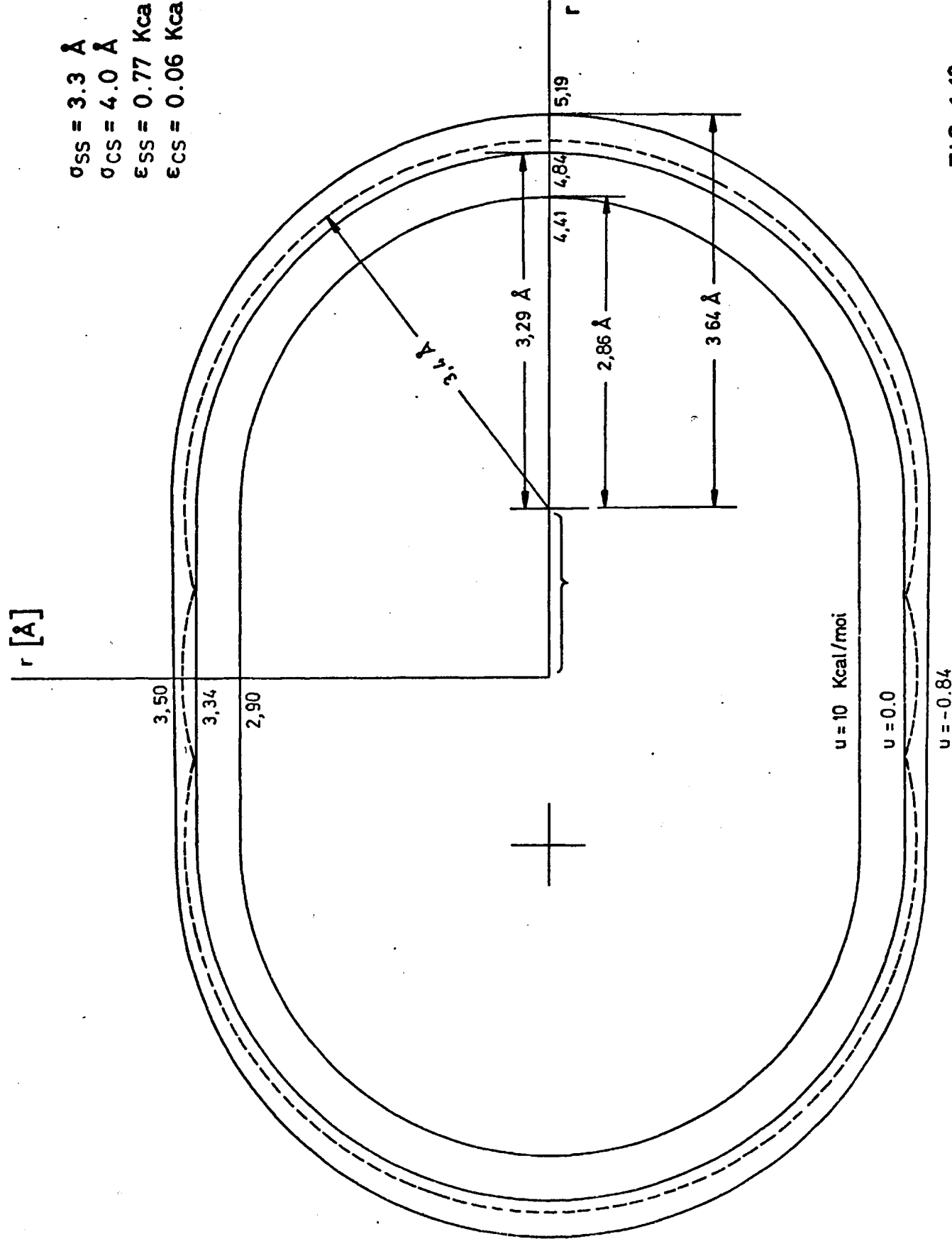


FIG. 1.12

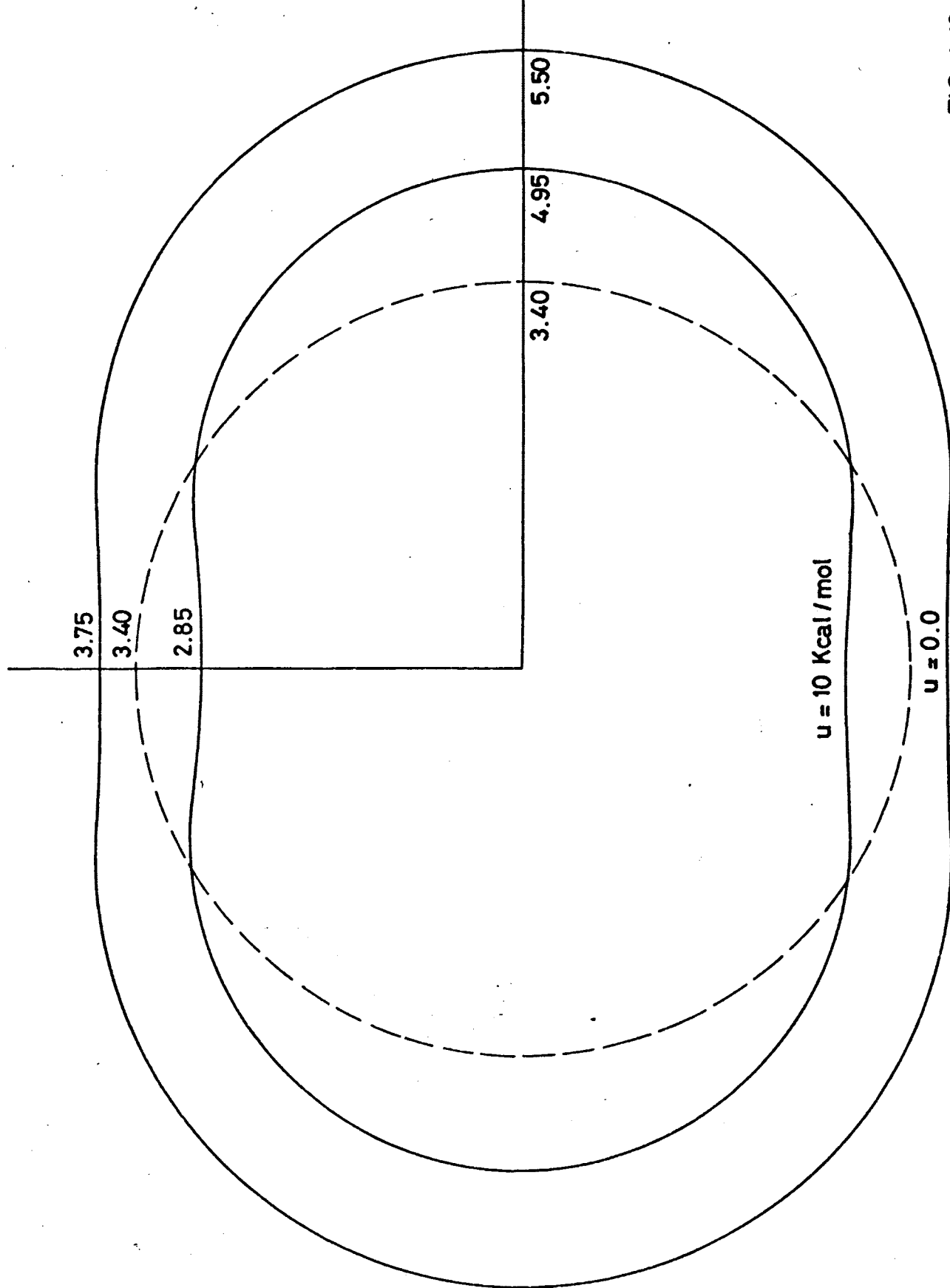


FIG. 1.13

Fig.1.14.- Funciones de distribución radial  $g_{ss}$  obtenidas para el  $CS_2$  por MC (caso III),  $DM^{35}$  y teoría RISM<sup>16</sup>.

Fig.1.15.- Funciones de distribución radial  $g_{sc}$  obtenidas para el  $CS_2$  por MC (caso III),  $DM^{35}$  y teoría RISM<sup>19</sup>.

Fig.1.16.- Funciones de distribución radial  $g_{cc}$  obtenidas para el  $CS_2$  por MC (caso III),  $DM^{35}$  y teoría RISM<sup>19</sup>.

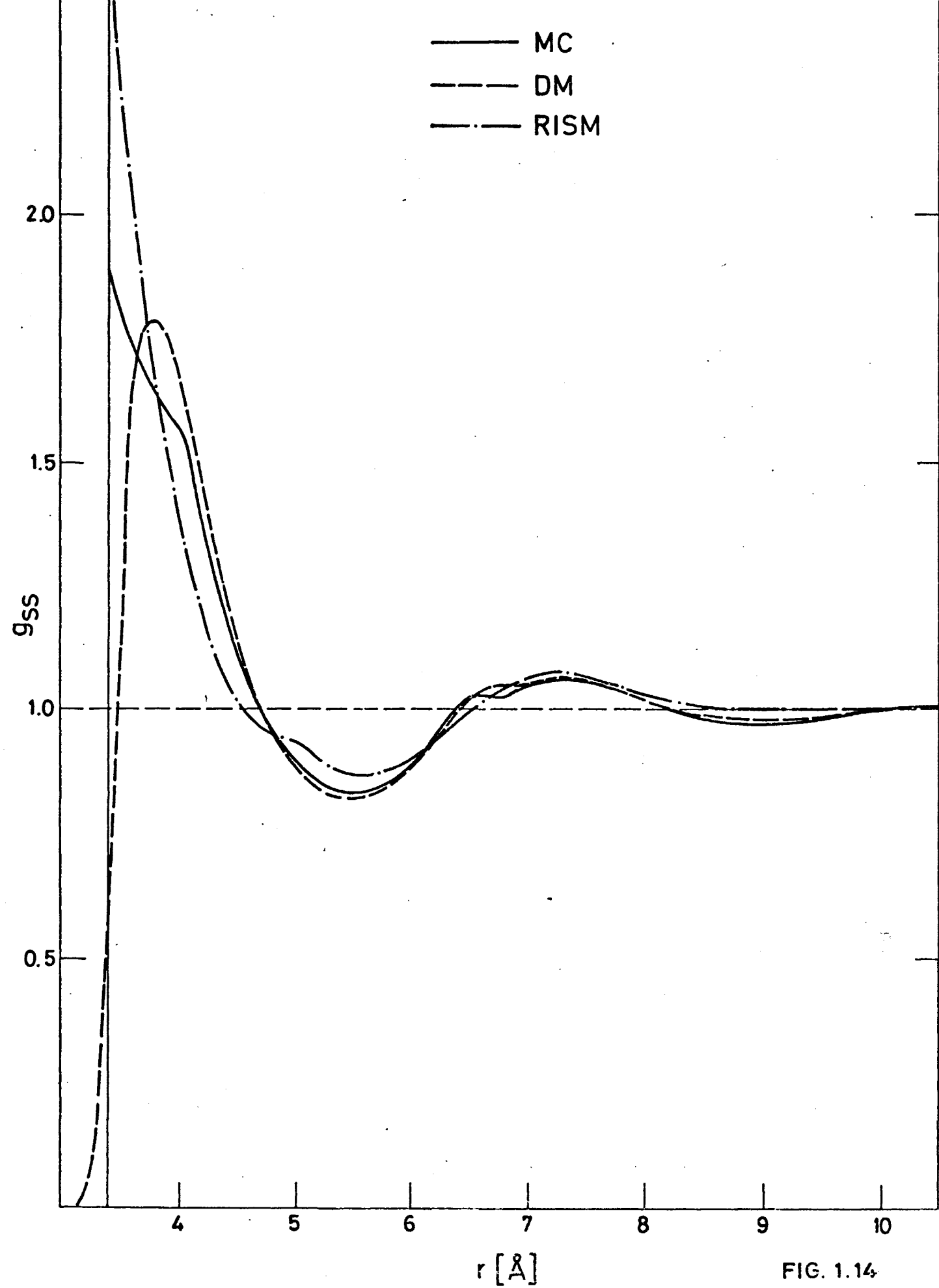


FIG. 1.14



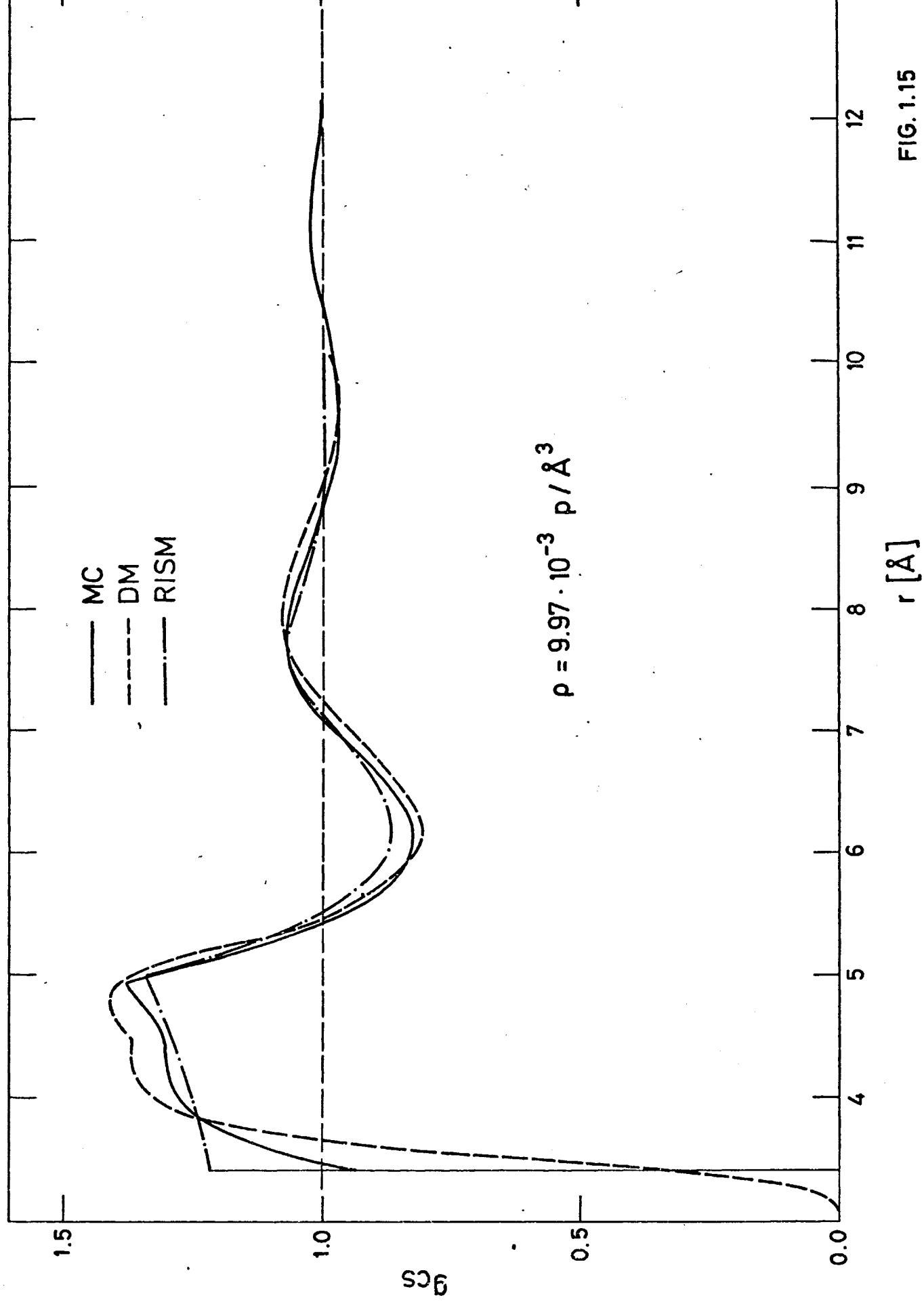


FIG. 1.15

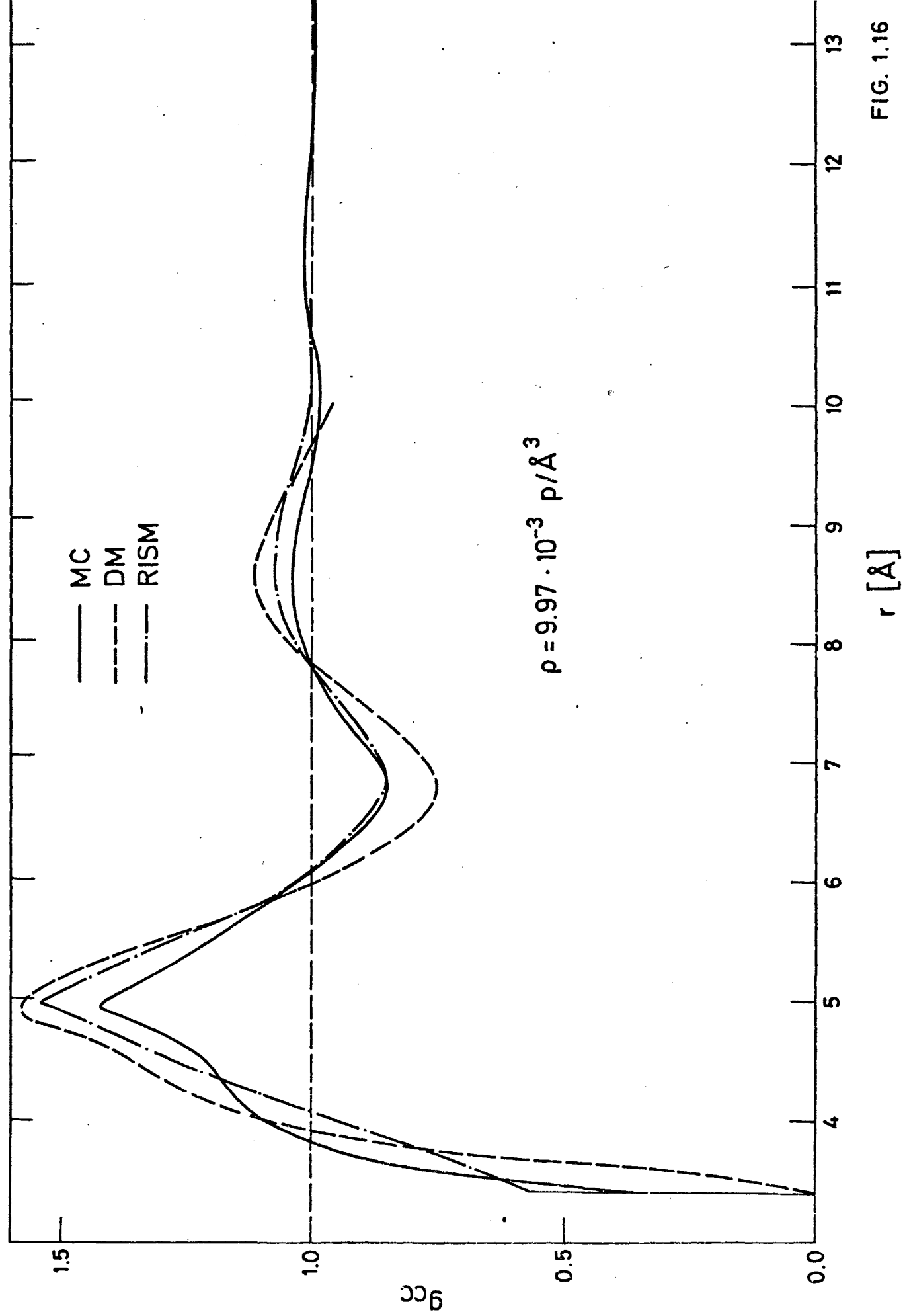


FIG. 1.16

Chandler. Pero los hechos más relevantes aparecen en lo que podríamos llamar la estructura fina de las funciones y que para el caso de DM se manifiesta en el pico y hombro que sobre los 4.2 Å presentan las funciones  $g_{sc}$  y  $g_{cc}$  respectivamente, y el pequeño pico que hay a los 6.5 Å en la  $g_{ss}$ . Para las funciones RISM tal estructura fina no existe en absoluto, lo cual condujo a Steinhauser a afirmar que para obtenerla era necesario, por tanto, introducir las fuerzas atractivas entre las partículas. Nuestros resultados desmienten esta conclusión, ya que como puede verse en las figuras, las funciones reflejan claramente, e incluso de una forma más acusada, como corresponde a un potencial duro, la susodicha estructura fina. Con esto comprobamos, como se había hecho en otras ocasiones, las limitaciones de la teoría RISM en cuanto a una descripción detallada de los fluidos, así como lo adecuado que resulta la utilización del modelo de partículas HISM, condicionado a una densidad, para obtener la estructura del  $CS_2$  con tanta precisión como el potencial de L-J (12:6), que incluye las fuerzas atractivas entre partículas de una forma explícita.

Para analizar si también este modelo es adecuado para describir la estructura del líquido  $CS_2$  real, hemos calculado el factor de estructura  $H_d(K)$  correspondiente a la difracción de rayos X y neutrones, a partir de las funciones de distribución radial del caso III, como hemos detallado anteriormente. Los resultados aparecen en las figuras 1.17 y 1.18, junto a los datos experimentales obtenidos por Sandler y Narten<sup>30</sup> con difracción de rayos X y por Gibson y Dore<sup>45</sup> con difracción de neutrones.

El primer cálculo teórico para el factor de estructura del  $CS_2$  lo realizaron Lowden y Chandler<sup>16</sup>, por medio de la teoría RISM, utilizando los mismos parámetros para el potencial que nosotros en los casos I al VI, pero los resultados fueron comparados con las medidas experimentales de Suzuki y Egelstaff, que después se ha comprobado son erróneas, por lo que no se pueden tener en cuenta las conclusiones allí obtenidas.

Fig.1.17.- Factor de estructura parcial  $H_d^X(K)$  para la difracción de rayos X por el  $CS_2$ . Los puntos corresponden a los datos experimentales<sup>5</sup> y la línea continua es el resultado de las transformadas de Fourier de las funciones de distribución radial obtenidas en el caso III.

Fig.1.18.- Factor de estructura parcial  $H_d^N(K)$  para la difracción de neutrones por el  $CS_2$ . Los puntos o corresponden a los datos experimentales de Gibson y Dore y la línea continua es el resultado de las transformadas de Fourier de las funciones de distribución radial obtenidas en el caso III.

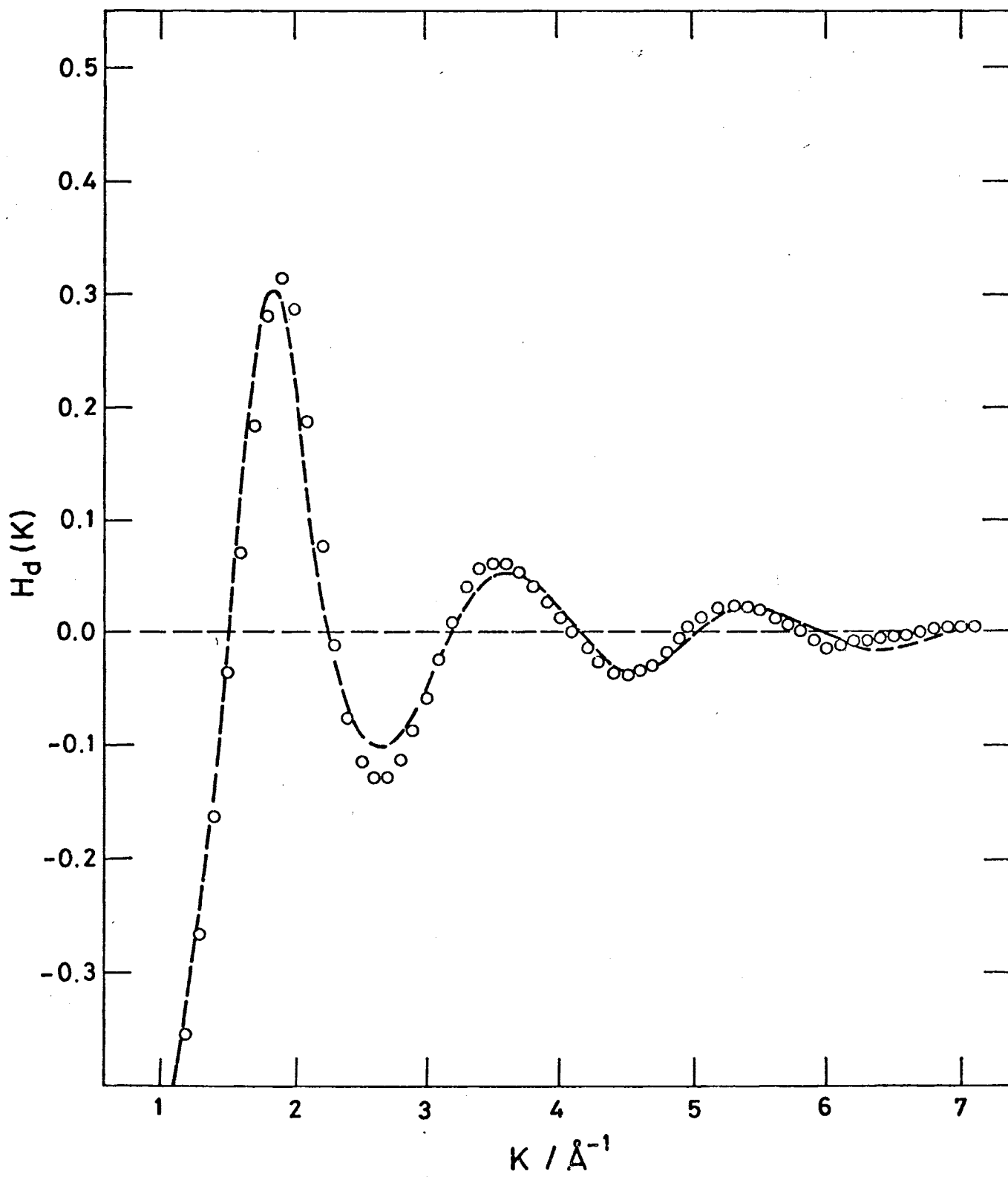


FIG. 1.17

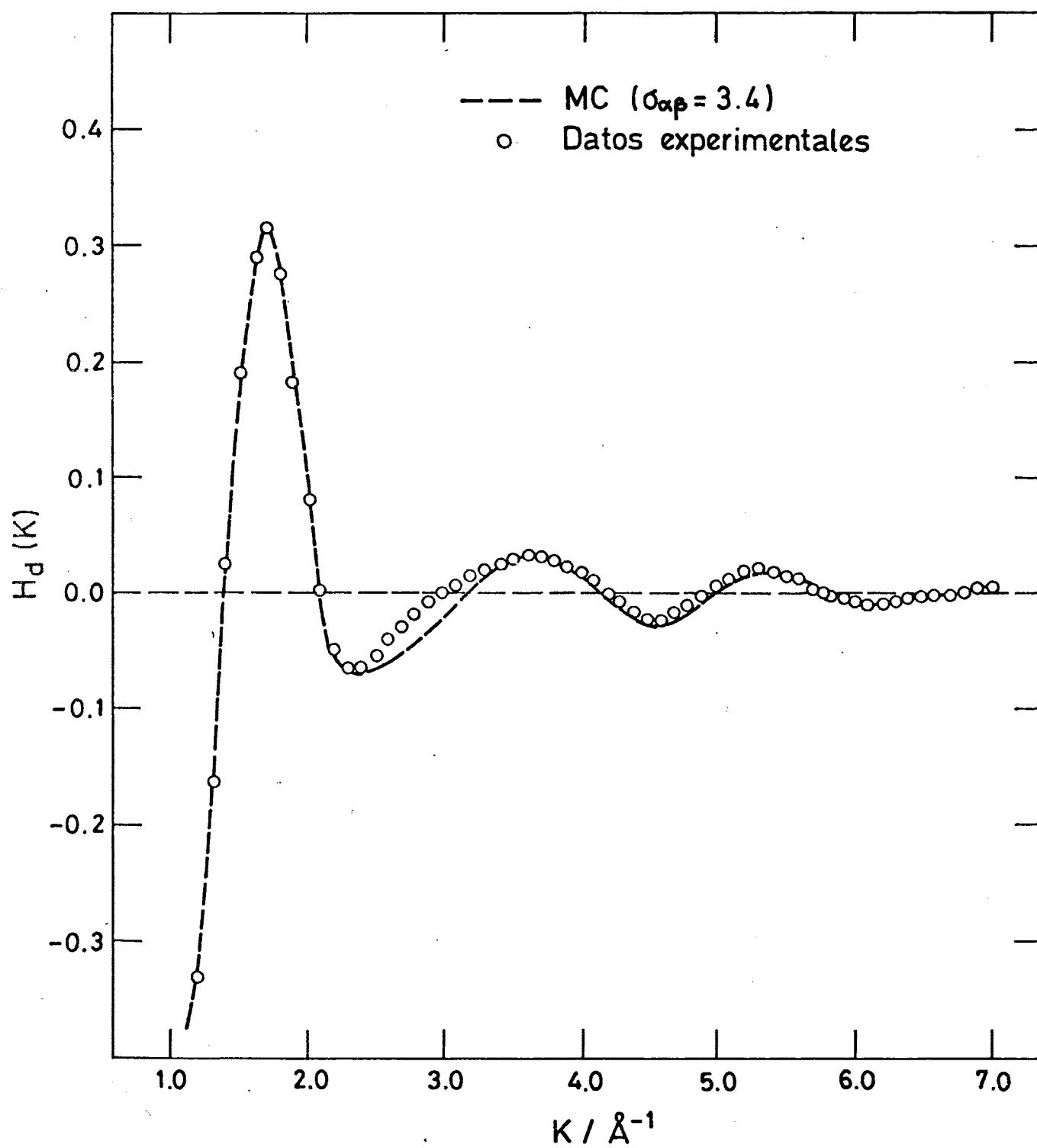


FIG. 1.18

Posteriormente Narten<sup>30</sup>, con los mismos parámetros de potencial, calculó  $H_d(K)$  y de la comparación con las medidas experimentales - obtenidas por él mismo, lo más reseñable son las grandes discrepancias, ya que los resultados precedentes de las funciones de distribución radial RISM no sólo no predicen adecuadamente la magnitud - de los picos, sino que tampoco los localizan correctamente, deca- yendo mucho más rápidamente que los valores experimentales. Esto - condujo a Narten a variar los parámetros del potencial, llegando a obtener un razonable acuerdo cuando éstos son  $\sigma_{cc} = 3.0 \text{ \AA}$  ;  $\sigma_{ss} = 3.5 \text{ \AA}$ ; con estos mismos valores Streett y Tildesley<sup>34</sup> han realiza- do una simulación MC aumentando aún más la concordancia. Sin embar- go nuestros resultados para rayos X y neutrones, que aparecen en - las figuras 1.17 y 1.18, empleando  $\sigma_{cc} = \sigma_{ss} = 3.4 \text{ \AA}$  producen global- mente un ajuste a los datos experimentales tan bueno como el de Streett. Para rayos X, antes de los  $3 \text{ \AA}^{-1}$ , sus datos se pueden con- siderar mejores, pero a partir de aquí son los nuestros los que se aproximan más. Para neutrones, se viene a corroborar la buena con- cordancia de nuestros resultados con los experimentales tomados de Gibson y Dore<sup>45</sup>.

La primera conclusión que se puede extraer de estos hechos es que, al igual que ocurrió con las funciones de distribución radial, descartar el modelo de potencial, o los parámetros propuestos por Chandler, por simple comparación con los resultados RISM, es clara- mente incorrecto, como nuestros resultados han puesto de manifies- to en ambas ocasiones.

Por otra parte, cabe destacar el hecho de que el factor de es- tructura no es una propiedad adecuada para determinar los paráme- tros de potencial, ya que como hemos visto, tanto los valores obte- nidos por Streett y por nosotros producen un excelente ajuste a - los datos experimentales, aunque los parámetros empleados en los - dos casos difieren muy significativamente.



Los resultados obtenidos en los casos I, IV, V y VI, nos permiten estudiar la variación de las funciones de distribución radial con la densidad. Dichas funciones aparecen en las figuras 1.19, 1.20, 1.21 y 1.22. Para la función  $g_{ss}$  los resultados se reducen a un progresivo aumento, con la densidad, en la magnitud de los máximos y mínimos, manteniendo las curvas un mismo hábito, siendo la única excepción el caso I, para el cual, y debido al brusco decrecimiento en el valor del máximo que se presenta a  $3.4 \text{ \AA}$ , aparece un segundo máximo, que en el resto de los casos sólo constituye un hombro por quedar englobado en la rama descendente del mencionado primer pico.

Para las funciones  $g_{cc}$  y  $g_{sc}$  el comportamiento es en cierta forma opuesto al anterior, ya que al aumentar la densidad, lo que era un hombro en la parte izquierda del primer pico de estas dos funciones, crece paulatinamente hasta convertirse en el máximo principal de la función para la densidad superior. De todas formas se encuentra que para obtener un cambio notable en las funciones de distribución es preciso provocar una drástica variación en la densidad y sólo para el caso V, con una densidad extraordinariamente elevada, la conformación de dichas funciones revela una modificación importante en la estructura del fluido. Pero esta cuestión la trataremos con más detalle a la vista de la función de distribución molecular en el apartado siguiente.

La variación de las funciones de distribución  $g_{cc}$ ,  $g_{sc}$  y  $g_{ss}$  con la densidad puede verse más claramente en las figuras 1.23, 1.24 y 1.25.

#### 1.6.- Función de distribución molecular

Actualmente el único sistema de evaluar de una forma exacta la función de distribución molecular  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$  es a través de



Fig. 1.19.- Funciones de distribución radial  $g_{ss}$ ,  $g_{sc}$  y  $g_{cc}$  obtenidas por MC (caso I) para

$$\rho = 0.85 \times 10^{-3} \text{ part.}\text{\AA}^{-3}$$

Fig. 1.20.- Funciones  $g_{ss}$ ,  $g_{sc}$  y  $g_{cc}$  obtenidas por MC (caso IV) para

$$\rho = 1.05 \times 10^{-2} \text{ part.}\text{\AA}^{-3}$$

Fig. 1.21.- Funciones  $g_{ss}$ ,  $g_{sc}$  y  $g_{cc}$  obtenidas por MC (caso V), para

$$\rho = 1.09 \times 10^{-2} \text{ part.}\text{\AA}^{-3}$$

Fig. 1.22.- Funciones  $g_{ss}$ ,  $g_{sc}$  y  $g_{cc}$  obtenidas por MC (caso VI), para

$$\rho = 1.1739 \times 10^{-2} \text{ part.}\text{\AA}^{-3}$$

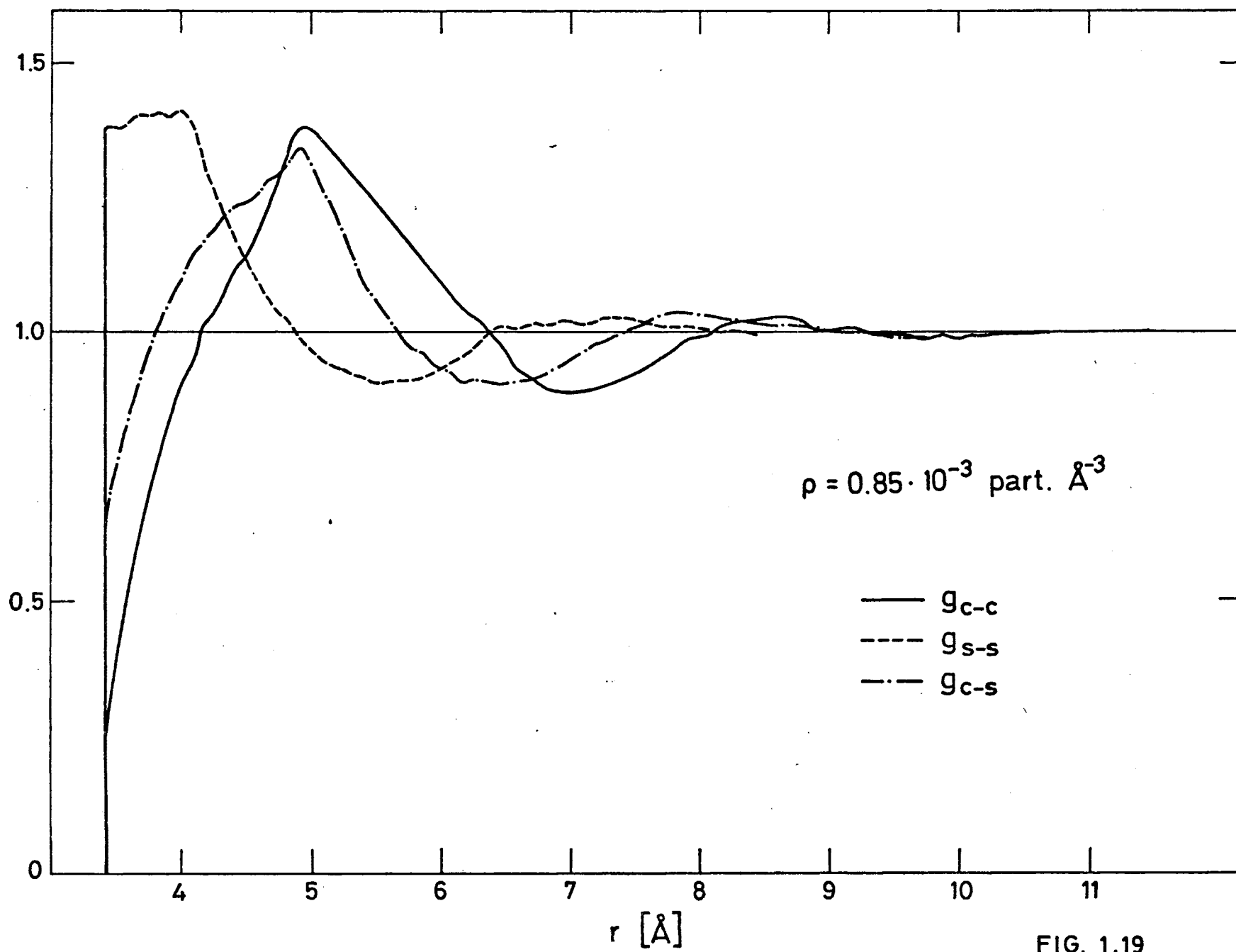


FIG. 1.19

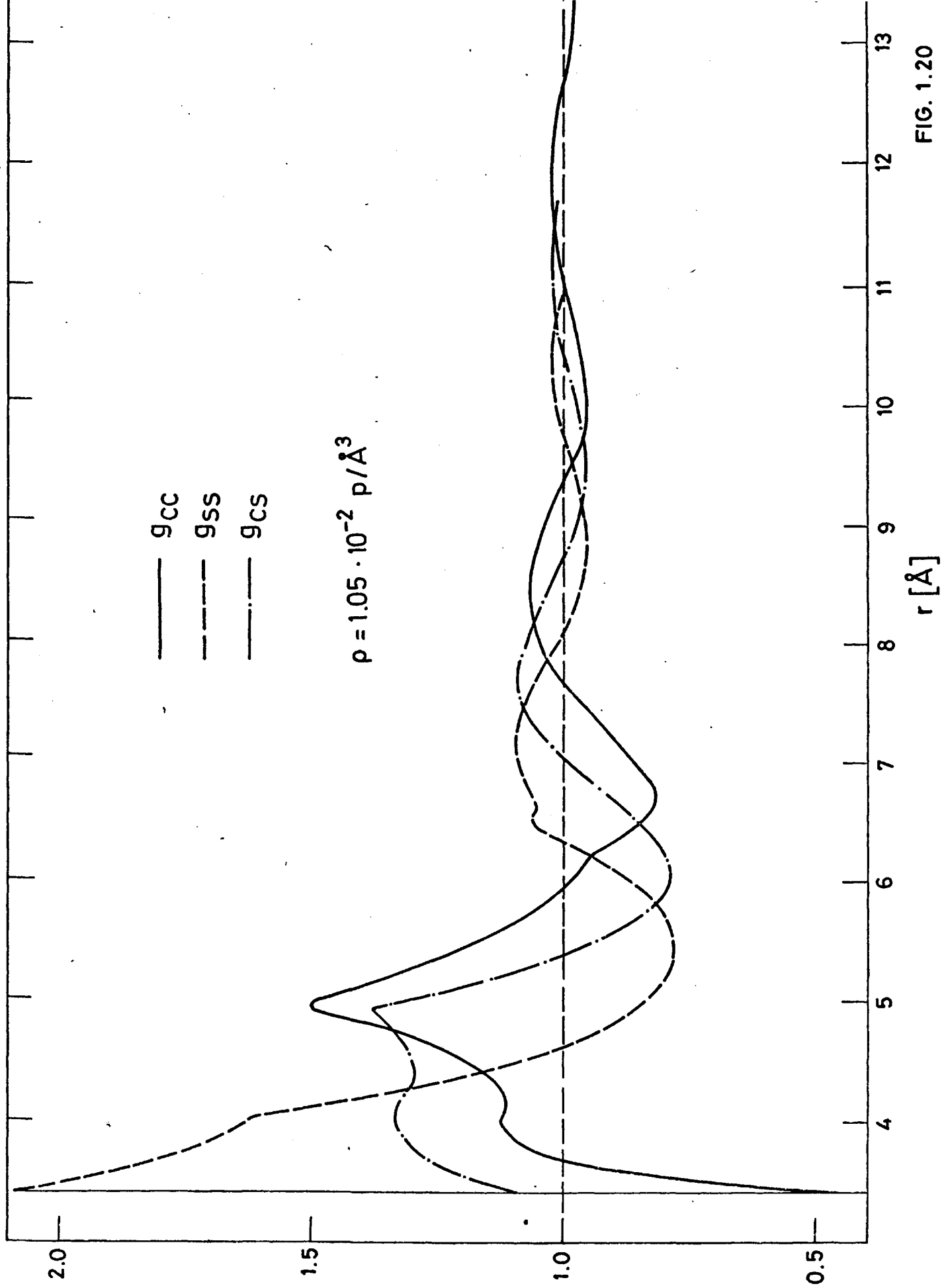


FIG. 1.20

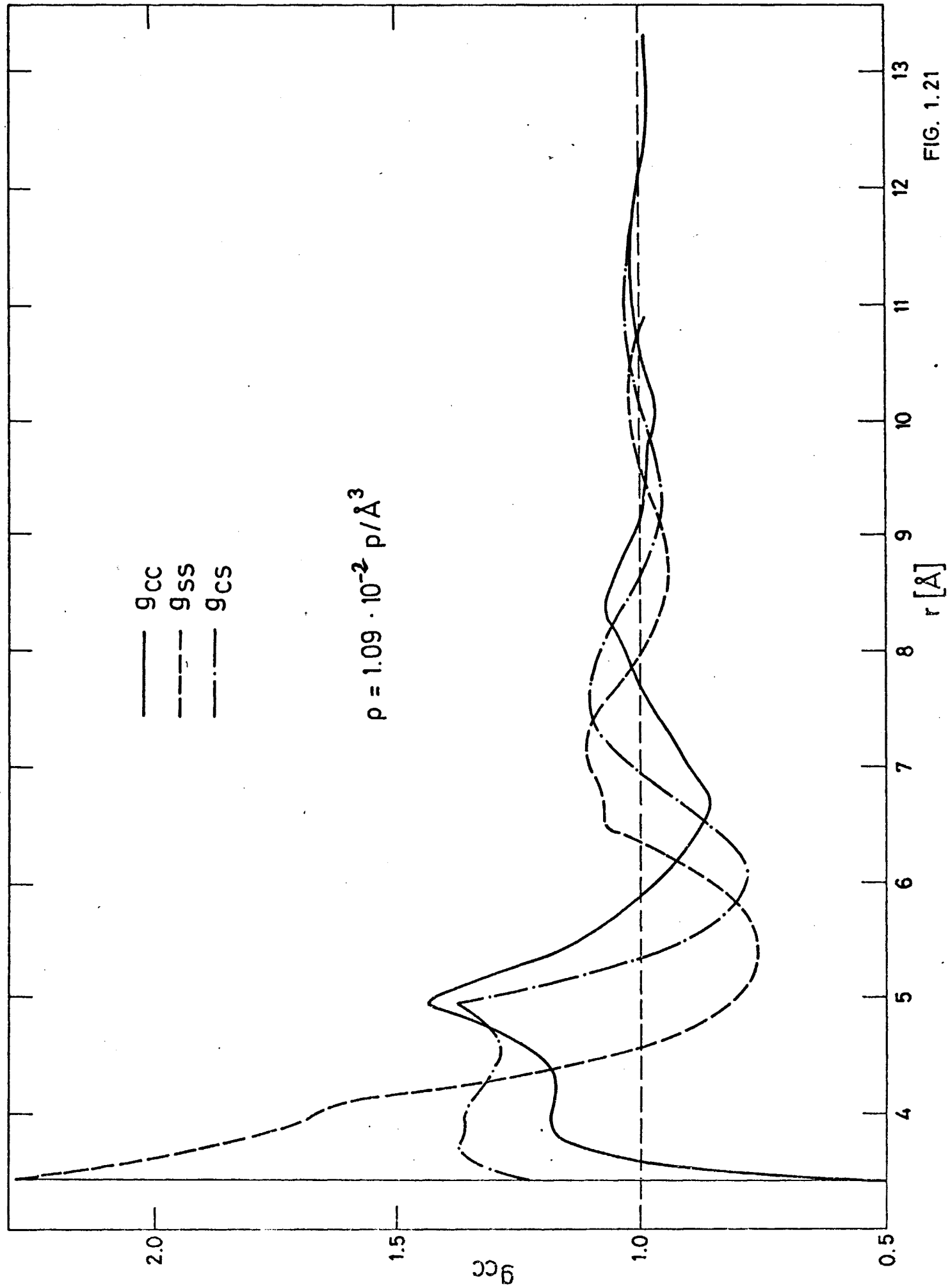


FIG. 1.21

$$\rho = 1.1739 \cdot 10^{-3} \text{ part. } \text{\AA}^{-3}$$

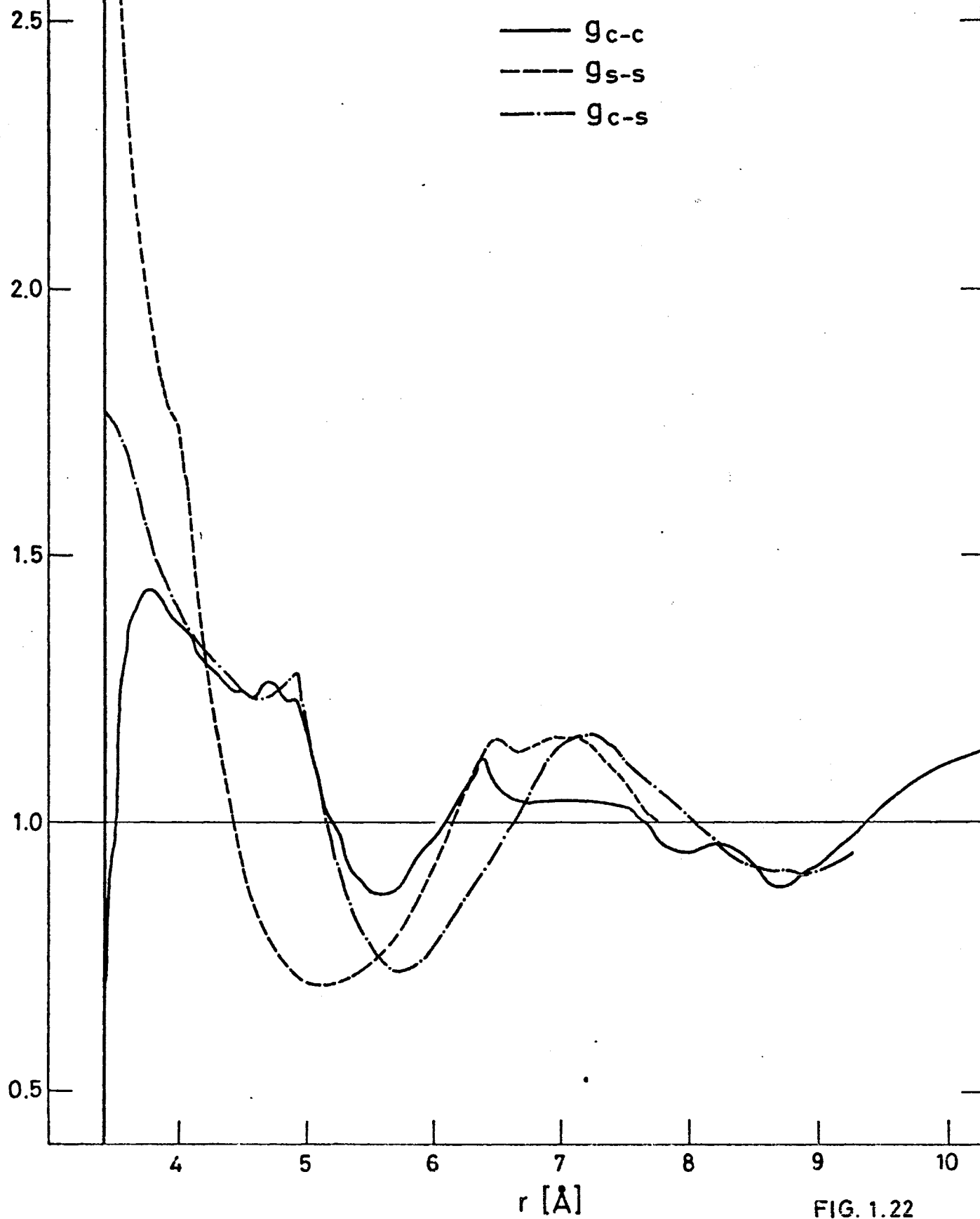


FIG. 1.22

Fig. 1.23.- Variación de la función de distribución radial  $g_{cc}(r)$  con la densidad para el modelo de esferas fusionadas de parámetros  $\sigma_{ss} = \sigma_{cc} = \sigma_{sc} = 3.4 \text{ \AA}$  y  $h = 1.55 \text{ \AA}$  (casos I al VI).

Fig. 1.24.- Variación con la densidad de  $g_{sc}(r)$  para el modelo de esferas fusionadas empleado en los casos I al VI.

Fig. 1.25.- Variación con la densidad de  $g_{ss}(r)$  para el modelo de esferas fusionadas empleado en los casos I al VI.

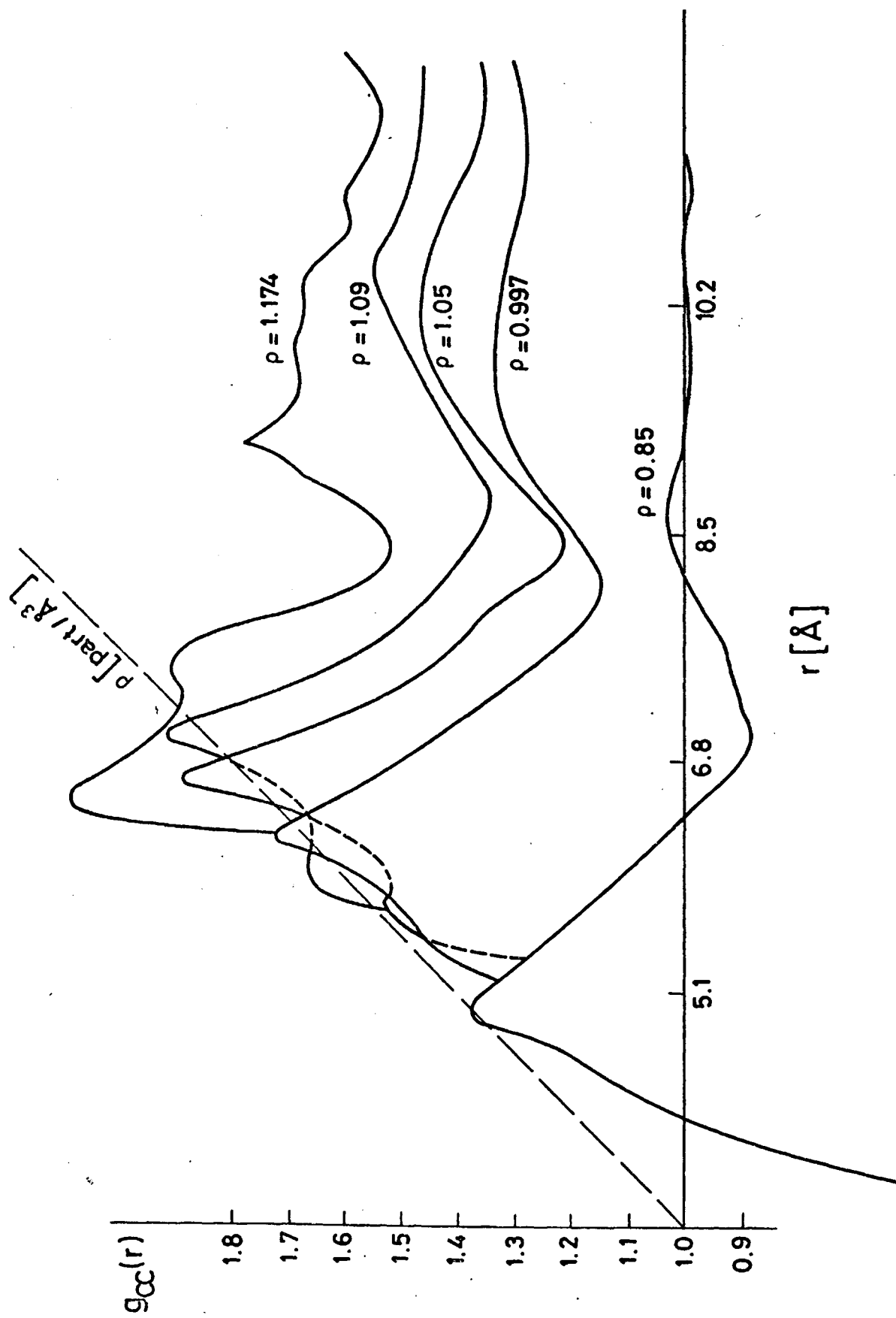


FIG. 1.23

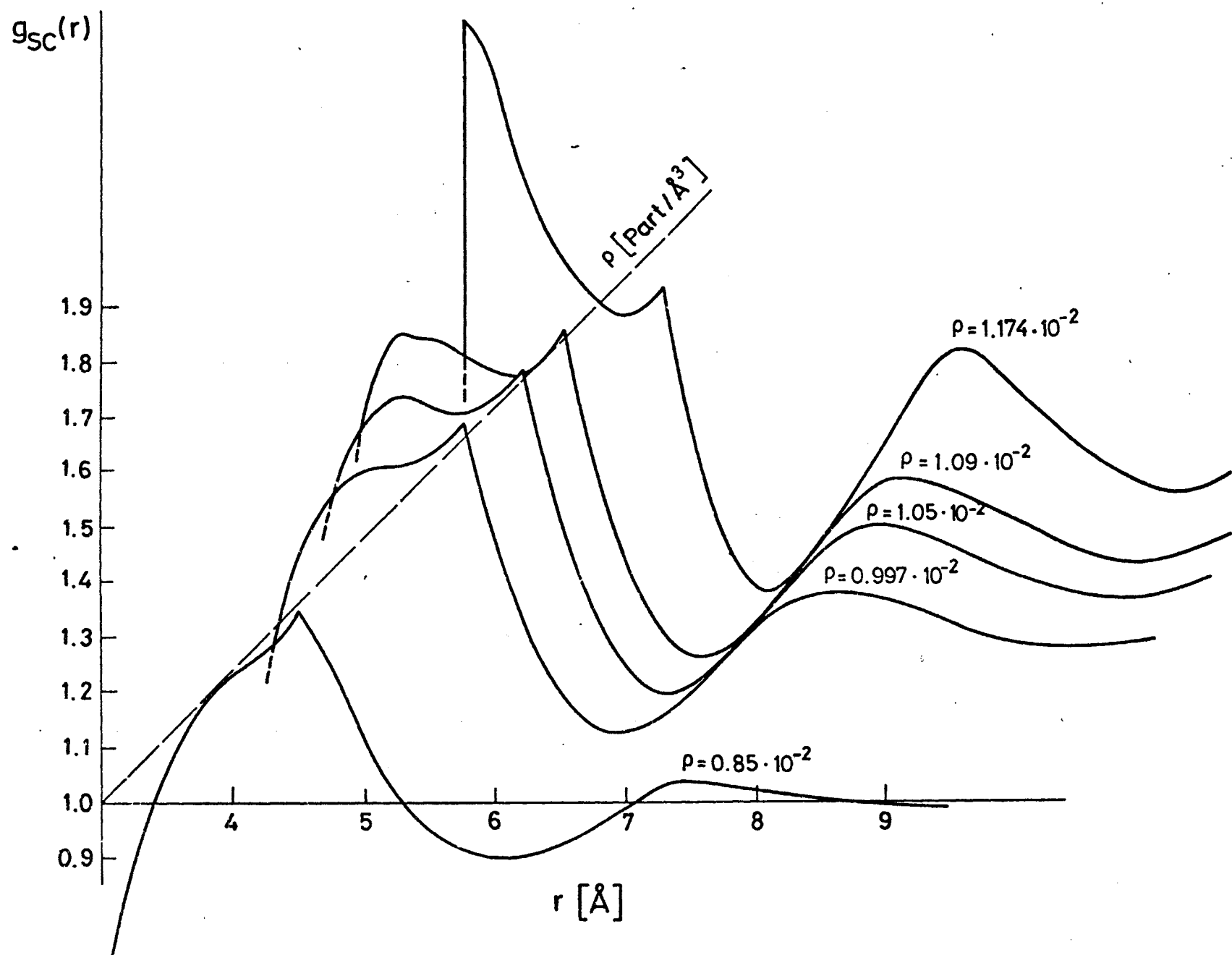


FIG. 1.24



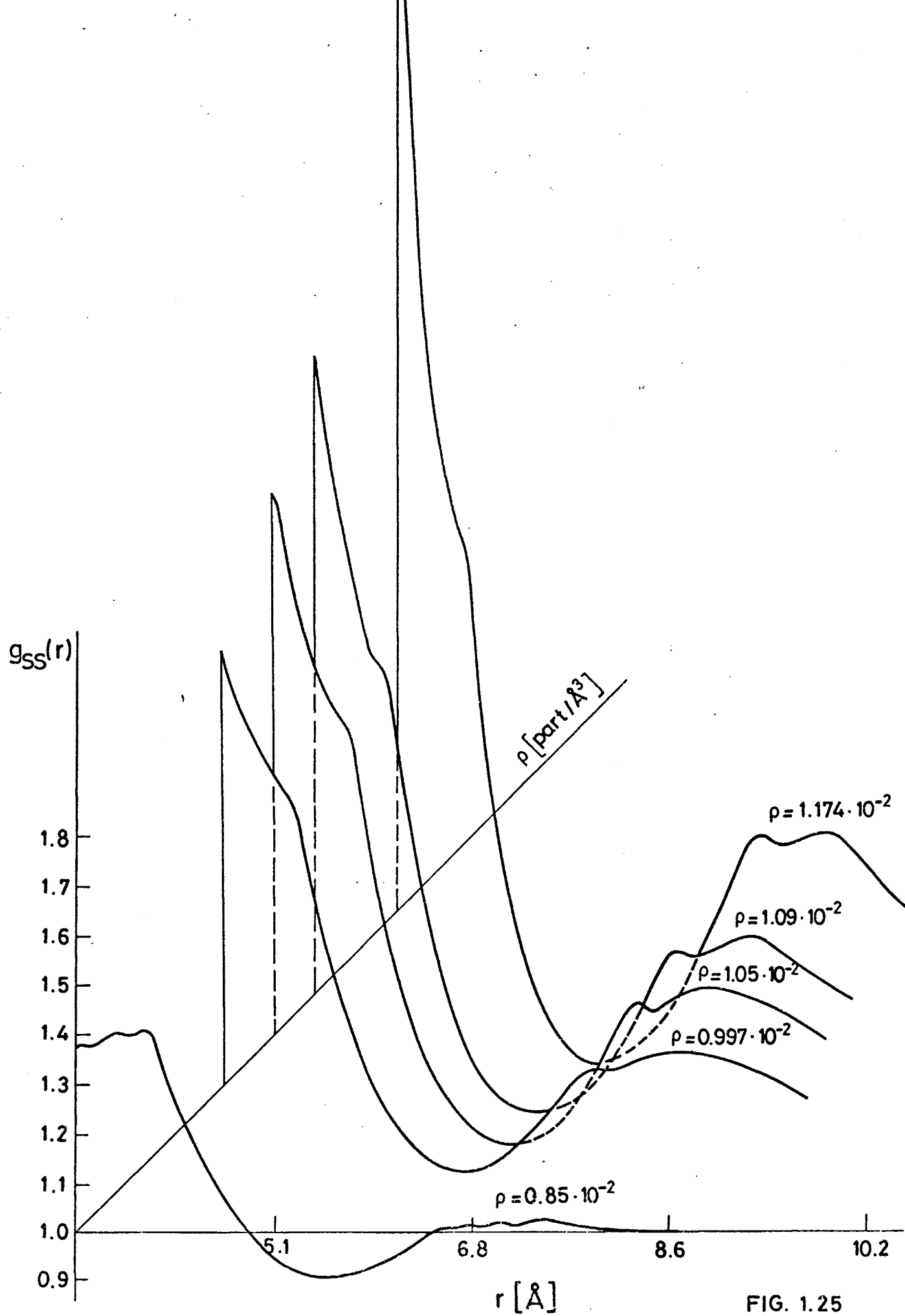


FIG. 1.25

una simulación, ya sea por DM o MC, mientras que para estimarla de una forma aproximada, se han empleado dos técnicas diferentes. La primera propuesta por Hsu y otros<sup>43</sup>, consiste en normalizar adecuadamente los productos de las funciones de distribución radial entre centros según:

$$g(r, \theta_1, \theta_2, \phi) = \frac{g_{cc}(r) \prod_{\alpha, \gamma=1}^3 g_{\alpha\beta}(r^{\alpha\alpha})}{\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta_2) \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta_1) \prod_{\alpha, \gamma=1}^3 g_{\alpha\gamma}(r^{\alpha\alpha})}$$

El segundo método, que es más correcto, desarrolla  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$  en serie de armónicos esféricos según:

$$g(r, \theta_1, \theta_2, \phi_{12}) = 4\pi \sum_{l, l', m} g_{ll', m}(r) Y_{lm}(\theta_1, \phi_1) Y_{l', m}(\theta_2, \phi_2)$$

Los coeficientes  $g_{ll', m}(r)$  hay que calcularlos también por métodos de simulación. Esta técnica ha sido muy bien estudiada por Street y Tildesley<sup>29</sup> en el caso del  $N_2$ , para el cual calcularon hasta el coeficiente  $n^2$  22, y encontraron que, si bien estos convergen adecuadamente, como los armónicos esféricos son divergentes, el producto de ambos no presenta una convergencia demasiado satisfactoria, además de que no para todos los coeficientes se obtiene la misma precisión, por cuestiones estadísticas.

Para la evaluación de la función de distribución molecular del  $CS_2$ , Narten<sup>30</sup> aplicó el primero de los métodos, empleando las funciones  $g_{\alpha\beta}$  obtenidas por la teoría RISM, con los parámetros de potencial  $\sigma_{cc}=3 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_{ss}=3.5 \text{ \AA}$  y  $d=1.57 \text{ \AA}$ , y con estos mismos parámetros, pero aplicando el segundo método con los coeficientes obtenidos por MC, Street y Tildesley<sup>34</sup> han efectuado asimismo una evaluación para la  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$  del  $CS_2$ .

También con los mismos parámetros que estos dos últimos traba

jos para la descripción de la molécula del  $\text{CS}_2$ , pero con las funciones de distribución radial entre centros obtenidas por Steinhau ser con los parámetros que se reseñan en la referencia 35, y que, del análisis que hemos hecho anteriormente sobre las curvas de energía potencial a que dan lugar dichos parámetros, no se pueden considerar equivalentes, Gibson y Dore<sup>45</sup> han tratado de indicar la correlación de orientación en la primera capa de coordinación para el fluido, pero por la razón anterior, y por lo simplista de sus consideraciones, no se pueden tener en cuenta sus resultados.

Nosotros, como hemos dicho anteriormente, hemos abordado directamente el cálculo de  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$ , aunque empleando los parámetros  $\sigma_{\text{cc}} = 3.4 \text{ \AA} = \sigma_{\text{ss}}$  y  $d = 1.55 \text{ \AA}$ , lo que desgraciadamente no permite establecer una comparación con los resultados anteriores, dado que no se podría establecer sin ambigüedades las discrepancias debidas a las aproximaciones de las debidas a las diferencias en los parámetros.

Según la división en histogramas que detallamos al comienzo de este capítulo, para cada valor de la distancia entre centros de masas de dos moléculas, nos aparecen 276 configuraciones angulares relativas, de este par de moléculas; los valores de  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$  para estas configuraciones en función de la distancia  $r$ , que hemos obtenido para el caso II, aparecen representados en las gráficas 1.26, 1.27, 1.28, 1.29, 1.30 y 1.31.  $|g(r, \Omega_1, \Omega_2)|_{ij}$  se ha expresado como el tanto por ciento de pares de moléculas que se encuentran en la configuración  $(\Omega_1, \Omega_2)_i$  a la distancia  $r_j$  respecto del total de pares que se encuentran en todas las configuraciones posibles a esa distancia  $r_j$ . En las figuras estos valores se trazan sobre el eje Z. En el eje X se muestra la variación con  $r$  en unidades arbitrarias de 1 a 50 que abarcan el intervalo  $(3.4, 11.56) \text{ \AA}$ . Cada perfil del eje y corresponde a una de las 276 configuraciones, repartidas de 50 en 50 para cada gráfica, y que corresponden a los valores de las variables angulares  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  y  $\psi$  que indican las tablas 1.2, 1.3, 1.4, 1.5, 1.6 y 1.7.

Fig. 1.26 a 1.31.- Representan el tanto por cien de pares de moléculas que para cada una de las configuraciones angulares ( $\theta_1$ ,  $\theta_2$ ,  $\Psi$ ) aparece en función de la distancia  $r$ . Una descripción más detallada se da en el texto.

TABLA 1.2.- Configuraciones angulares de las figuras 1.26 y 2.4.

Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\Psi$	Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\Psi$
1	61.9	84.4	129.4	26	73.1	84.4	84.4
2	"	"	140.6	27	"	"	95.6
3	"	"	151.9	28	"	"	106.9
4	"	"	163.1	29	"	"	118.1
5	73.1	73.1	5.6	30	"	"	129.4
6	"	"	16.9	31	"	"	140.6
7	"	"	28.1	32	"	"	151.9
8	"	"	39.4	33	"	"	163.1
9	"	"	50.6	34	"	"	174.4
10	"	"	61.9	35	84.4	84.4	5.6
11	"	"	73.1	36	"	"	16.9
12	"	"	84.4	37	"	"	28.1
13	"	"	95.6	38	"	"	39.4
14	"	"	106.9	39	"	"	50.6
15	"	"	118.1	40	"	"	61.9
16	"	"	129.4	41	"	"	73.1
17	"	"	140.6	42	"	"	84.4
18	"	"	151.9	43	"	"	95.6
19	"	"	163.1	44	"	"	106.9
20	"	84.4	16.9	45	"	"	118.1
21	"	"	28.1	46	"	"	129.4
22	"	"	39.4	47	"	"	140.6
23	"	"	50.6	48	"	"	151.9
24	"	"	61.9	49	"	"	163.1
25	"	"	73.1	50	"	"	174.4



TABLA 1.3.- Configuraciones angulares de las figuras 1.27 y 2.5.

Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\psi$	Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\psi$
1	50.6	73.1	106.9	26	61.9	61.9	118.1
2	"	"	118.1	27	"	"	129.4
3	"	"	120.4	28	"	"	140.6
4	"	"	140.6	29	"	73.1	16.9
5	"	84.4	39.4	30	"	"	28.1
6	"	"	50.6	31	"	"	39.4
7	"	"	61.9	32	"	"	50.6
8	"	"	73.1	33	"	"	61.9
9	"	"	84.4	34	"	"	73.1
10	"	"	95.6	35	"	"	84.4
11	"	"	106.9	36	"	"	95.6
12	"	"	118.1	37	"	"	106.9
13	"	"	129.4	38	"	"	118.1
14	"	"	140.6	39	"	"	129.4
15	"	"	151.9	40	"	"	140.6
16	61.9	61.9	5.6	41	"	"	151.9
17	"	"	16.9	42	"	84.4	28.1
18	"	"	28.1	43	"		39.4
19	"	"	39.4	44	"		50.6
20	"	"	50.6	45	"		61.9
21	"	"	61.9	46	"		73.1
22	"	"	73.1	47	"		84.4
23	"	"	84.4	48	"		95.6
24	"	"	95.6	49	"		106.9
25	"	"	106.9	50	"		118.1

0.00 0.05 0.10 0.15 0.20 0.25 0.30 0.35 0.40 0.45 0.50 0.55 0.60 0.65 0.70 0.75 0.80 0.85 0.90 0.95 1.00

F: MOLECULAR\*10\*10

1.00 0.95 0.90 0.85 0.80 0.75 0.70 0.65 0.60 0.55 0.50 0.45 0.40 0.35 0.30 0.25 0.20 0.15 0.10 0.05 0.00

FIG. 1.27

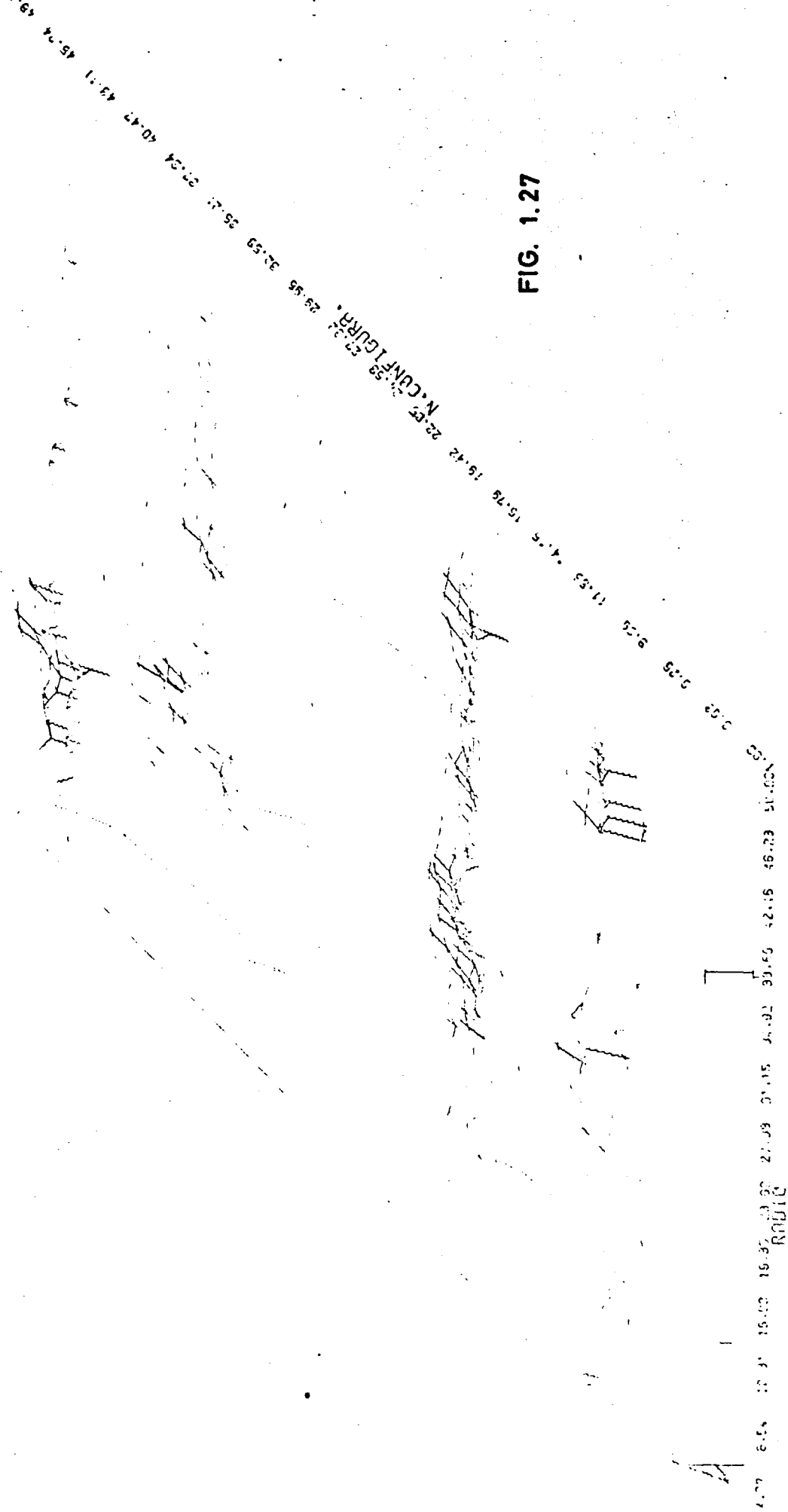




TABLA 1.4.- Configuraciones angulares de las figuras 1.28 y 2.6.

Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\psi$	Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\psi$
1	39.4	61.9	95.6	26	50.6	50.6	50.6
2	"	"	106.9	27	"	"	61.9
3	"	"	118.1	28	"	"	73.1
4	"	73.1	39.4	29	"	"	84.4
5	"	"	50.6	30	"	"	95.6
6	"	"	61.9	31	"	"	106.9
7	"	"	73.1	32	"	"	118.1
8	"	"	84.4	33	"	61.9	16.9
9	"	"	95.6	34	"	"	28.1
10	"	"	106.9	35	"	"	39.4
11	"	"	118.1	36	"	"	50.6
12	"	"	129.4	37	"	"	61.9
13	"	84.4	50.6	38	"	"	73.1
14	"	"	61.9	39	"	"	84.4
15	"	"	73.1	40	"	"	95.6
16	"	"	84.4	41	"	"	106.9
17	"	"	95.6	42	"	"	118.1
18	"	"	106.9	43	"	"	129.4
19	"	"	118.1	44	"	73.1	28.1
20	"	"	129.4	45	"		39.4
21	"	"	140.6	46	"		50.6
22	50.6	50.6	5.6	47	"		61.9
23		16.9		48	"		73.1
24		28.1		49	"		84.4
25		39.4		50	"		95.6

**FIG. 1.28**

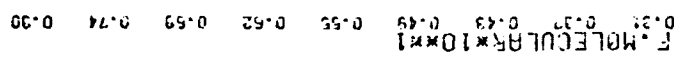


TABLA 1.5.- Configuraciones angulares de las figuras 1.29 y 2.7.

Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\Psi$	Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\Psi$
1	28.1	50.6	50.6	26	28.1	84.4	129.4
2	"	"	61.9	27	39.4	39.4	5.6
3	"	"	73.1	28		"	16.9
4	"	"	84.4	29		"	28.1
5	"	"	95.6	30		"	39.4
6	"	61.9	39.4	31		"	50.6
7	"	"	50.6	32		"	61.9
8	"	"	61.9	33		"	73.1
9	"	"	73.1	34		"	84.4
10	"	"	84.4	35		"	95.6
11	"	"	95.6	36		50.6	16.9
12	"	"	106.9	37		"	28.1
13	"	73.1	50.6	38		"	39.4
14	"	"	61.9	39		"	50.6
15	"	"	73.1	40		"	61.9
16	"	"	84.4	41		"	73.1
17	"	"	95.6	42		"	84.4
18	"	"	106.9	43		"	95.6
19	"	"	118.1	44		"	106.9
20	"	84.4	61.9	45		61.9	28.1
21	"	"	73.1	46		"	39.4
22	"	"	84.4	47		"	50.6
23	"	"	95.6	48		"	61.9
24	"	"	106.9	49		"	73.1
25	"	"	118.1	50		"	84.4

F. MOLECULAR  $\times 10^{-4}$

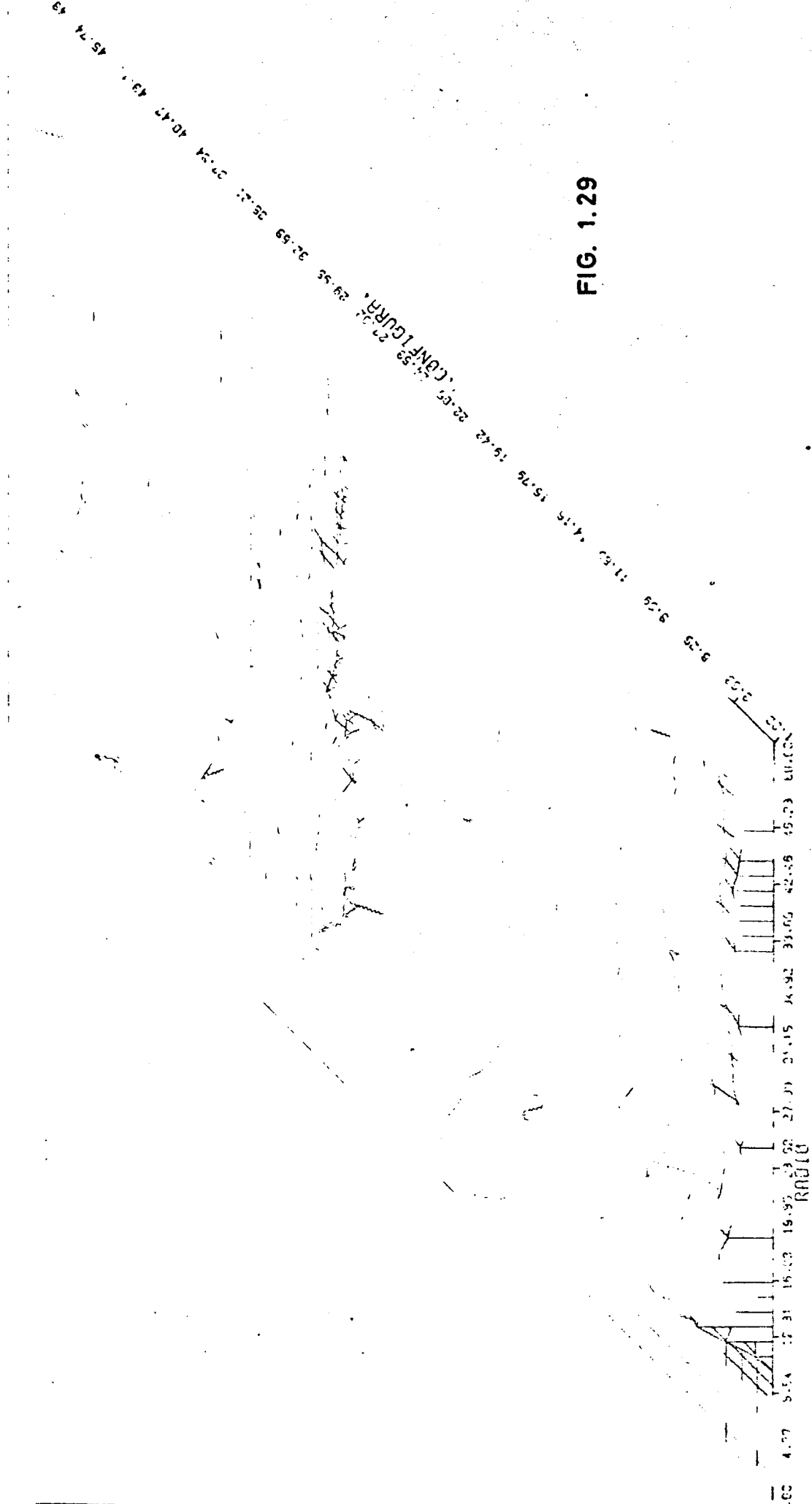


FIG. 1.29

TABLA 1.6.- Configuraciones angulares de las figuras 1.30 y 2.8.

Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\Psi$	Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\Psi$
1	16.9	16.9	16.9	26	16.9	73.1	73.1
2	"	"	28.1	27	"	"	84.4
3	"	"	39.4	28	"	"	95.6
4	"	"	50.6	29	"	"	106.9
5	"	28.1	16.9	30	"	84.4	73.1
6	"	"	28.1	31	"	"	84.4
7	"	"	39.4	32	"	"	95.6
8	"	"	50.6	33	"	"	106.9
9	"	"	61.9	34	"	"	118.1
10	"	39.4	28.1	35	28.1	28.1	5.6
11	"	"	39.4	36	"	"	16.9
12	"	"	50.6	37	"	"	28.1
13	"	"	61.9	38	"	"	39.4
14	"	"	73.1	39	"	"	50.6
15	"	50.6	39.4	40	"	"	61.9
16	"	"	50.6	41	"	"	73.1
17	"	"	61.9	42	"	39.4	16.9
18	"	"	73.1	43	"	"	28.1
19	"	"	84.4	44	"	"	39.4
20	"	61.9	50.6	45	"	"	50.6
21	"	"	61.9	46	"	"	61.9
22	"	"	73.1	47	"	"	73.1
23	"	"	84.4	48	"	"	84.4
24	"	"	95.6	49	"	50.6	28.1
25	"	73.1	61.9	50	"	"	39.4

FIG. 1.30

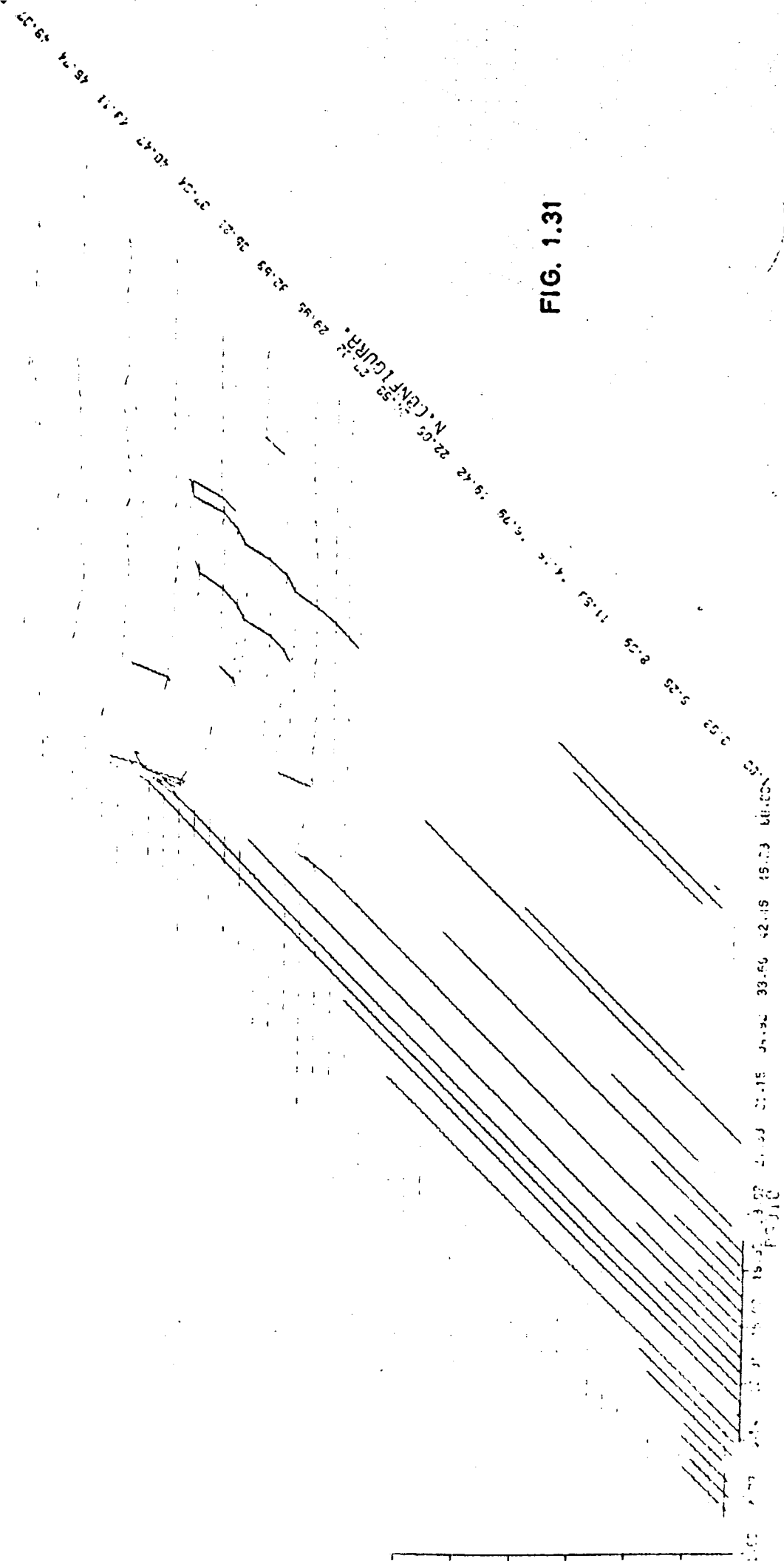
1.00 4.77 9.54 17.91 15.00 19.35 23.02 27.00 31.15 34.92 39.50 42.45 45.03 50.00

ROAD

TABLA 1.7.- Configuraciones angulares de las figuras 1.31 y 2.9.

Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\Psi$	Número de perfil "Y"	$\theta_1$	$\theta_2$	$\Psi$
1				26	5.6	5.6	5.6
2				27	"	"	16.9
3				28	"	"	28.1
4				29	"	16.9	16.9
5				30	"	"	28.1
6				31	"	"	39.4
7				32	"	28.1	28.1
8				33	"	"	39.4
9				34	"	"	50.6
10				35	"	39.4	39.4
11				36	"	"	50.6
12				37	"	"	61.9
13				38	"	50.6	50.6
14				39	"	"	61.9
15				40	"	"	73.1
16				41	"	61.9	61.9
17				42	"	"	73.1
18				43	"	"	84.4
19				44	"	73.1	73.1
20				45	"	"	84.4
21				46	"	"	95.6
22				47	"	84.4	84.4
23				48	"	"	95.6
24				49	"	"	106.9
25				50	16.9	16.9	5.6

FIG. 1.31





Asimismo hemos efectuado el cálculo de la función de distribución molecular para los casos I y VI, y para estas tres densidades y en función de la distancia, hemos hallado para cual de las mencionadas 276 configuraciones  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$  es máxima, apareciendo los resultados en la tabla 1.9. La tabla 1.10 recoge también las configuraciones para las que se obtiene un máximo, pero ya no de  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$  sino de:

$$F(r, \theta_1, \theta_2) = \int_0^r g(r, \theta_1, \theta_2) dr$$

Es decir, las configuraciones de pares de moléculas que más predominan, no "a" la distancia  $r$ , sino "hasta" la distancia  $r$  desde  $r=0$ . En estas tablas se ha utilizado para cada una de las configuraciones una nomenclatura que utilizaremos cuando nos refiramos a ellas con posterioridad, y que ha sido definida en la tabla 1.8.

En primer lugar se observa que en la tabla 1.9, para el conjunto de las tres densidades, sólo aparecen 31 configuraciones diferentes, y que el número de ellas para cada una de las densidades disminuye al aumentar ésta, como corresponde al aumento en el empaquetamiento que se produce en el fluido. Para la tabla 1.10, la restricción es aún más significativa, pues a partir de los 3.75 Å, a la densidad superior sólo aparecen las configuraciones B y A, y a las otras densidades tan sólo la A. Como ya se vió con las funciones de distribución radial de centros, mientras para los casos I y II la estructura es análoga, para el caso VI se encuentra una notable diferencia.

La representación del tanto por ciento de pares de moléculas que se encuentran en aquellas configuraciones que más se repiten en las tablas 1.9 y 1.10, así como para la configuración paralela ( $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2, \Psi = 0$ ) y la perpendicular ( $\theta_1 = \pi/2, \theta_2 = 0$ ) en función de la distancia aparecen en las figuras 1.32, 1.33 y 1.34

Para la configuración paralela se han representado además los

TABLA 1.8.- Nomenclatura de configuraciones angulares.

Identifi- cador	$\theta_1$	$\theta_2$	$\psi$
A	73.1	84.4	28.1
B	61.9	73.1	28.1
C	61.9	73.1	140.6
D	50.6	61.9	118.1
E	39.4	50.6	84.4
F	28.1	50.6	73.1
G	39.4	61.9	106.9
H	50.6	73.1	120.4
I	50.6	61.9	28.1
J	28.1	84.4	118.1
K	28.1	84.4	73.1
L	16.9	28.1	16.9
M	16.9	28.1	50.6
N	16.9	39.4	39.4
O	28.1	39.4	28.1
P	28.1	50.6	39.4
Q	28.1	50.6	84.4
R	28.1	61.9	50.6
S	28.1	73.1	61.9
T	39.4	50.6	28.1
U	39.4	61.9	39.4
V	39.4	73.1	50.6
W	39.4	84.4	61.9
X	50.6	73.1	28.1
Y	50.6	84.4	39.4
Z	50.6	84.4	50.6
A1	61.9	84.4	28.1
A2	73.1	84.4	151.9
A3	73.1	84.4	163.1
A4	84.4	84.4	5.6
A5	84.4	84.4	28.1

TABLA 1.9.- Configuraciones angulares que dan un máximo en  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$  a una distancia  $r$  especificada.

r	CASO I	CASO II	CASO VI	r	CASO I	CASO II	CASO VI
3.40	A5	A5	A4	7.65	A	B	A
3.57	A4	A4	A4	7.82	B	B	A
3.74	A	A	A	7.99	B	C	B
3.91	A	A	B	8.16	A1	C	B
4.08	B	B	B	8.33	B	B	X
4.25	B	I	I	8.50	A1	C	I
4.42	Z	I	I	8.67	A3	H	V
4.59	W	W	V	8.84	A3	H	U
4.76	V	K	U	9.01	Z	H	I
4.93	K	J	S	9.18	C	D	T
5.10	J	J	R	9.35	A1	D	T
5.27	D	D	T	9.52	A1	G	T
5.44	G	G	P	9.69	A1	E	A
5.61	G	E	P	9.86	A	B	A3
5.78	E	E	O	10.03	A1	G	A
5.95	Q	E	O	10.20	A1	D	A3
6.12	E	F	N	10.37	A1	B	A
6.29	F	F	N	10.54	A2	A	A
6.46	M	F	L	10.71	A3	A2	A
6.63	F	F	A	10.88	A3	A1	A
6.80	F	A3	A	11.05	A	A	A
6.97	A3	A	A	11.22	A1	A	A
7.14	A	A	A	11.39	A2	B	A
7.31	A	A	A	11.56	A3	B	A
7.48	A	A	A				

TABLA 1.10.- Configuraciones angulares que predominan hasta una distancia r especificada.

r	CASO I	CASO II	CASO VI	r	CASO I	CASO II	CASO VI
3.40	A5	A5	A4	7.65	A	A	A
3.57	A4	A4	A4	7.82	"	"	"
3.74	A4	A4	A4	7.99	"	"	"
3.91	A	A	A	8.16	"	"	"
4.08	"	"	A	8.33	"	"	"
4.25	"	"	A	8.50	"	"	"
4.42	"	"	B	8.67	"	"	"
4.59	"	"	B	8.84	"	"	"
4.76	"	"	B	9.01	"	"	"
4.93	"	"	B	9.18	"	"	"
5.10	"	"	B	9.35	"	"	"
5.27	"	"	B	9.52	"	"	"
5.44	"	"	B	9.69	"	"	"
5.61	"	"	B	9.86	"	"	"
5.78	"	"	B	10.03	"	"	"
5.95	"	"	B	10.20	"	"	"
6.12	"	"	B	10.37	"	"	"
6.29	"	"	B	10.54	"	"	"
6.46	"	"	A	10.71	"	"	"
6.63	"	"	A	10.88	"	"	"
6.80	"	"	A	11.05	"	"	"
6.97	"	"	A	11.22	"	"	"
7.14	"	"	A	11.39	"	"	"
7.31	"	"	A	11.56	"	"	"
7.48	"	"	A				

valores que toma  $g(r, \Omega_1, \Omega_2)$  fijando  $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$ , al variar el ángulo  $\Psi$ , a las distancias de contacto y del primer máximo.

De la figura 1.32, que corresponde al  $\text{CS}_2$  a la densidad real a temperatura ambiente, se observa que ninguna de estas configuraciones, que son precisamente las de predominio máximo, llega a ser por sí misma representativa del líquido, pues no llegan a constituir ni siquiera el 10% del total, y eso en su punto máximo, que sólo ocurre en un intervalo muy corto de distancias, cercano a la primera capa de coordinación, decayendo muy rápidamente su predominio, para sólo volver a ser significativo, aunque en mucha menor cuenta, a distancias próximas a la segunda capa de coordinación.

Sin embargo, si tenemos en cuenta que las configuraciones (A), (B) y (C) realmente son variaciones en torno a la situación geométrica de dos moléculas con sus ejes paralelos pero desplazadas una sobre otra de modo que la línea que une sus centros de masas forma un ángulo comprendido entre  $\pi/4$  y  $\pi/2$ , la suma de éstas sí alcanza un valor suficientemente grande como para que se pueda hablar de una preponderancia de correlación en la estructura del líquido, y que podemos considerar más a favor de la correlación paralela que de la configuración perpendicular o en T; no obstante, alrededor de los 5 Å, que se corresponde aproximadamente con el máximo de la función de distribución de centros de masas, la proporción de pares en T es superior al de pares paralelos, aunque más bien podría hablarse de un decrecimiento del predominio paralelo, que de un predominio real de la configuración perpendicular, pues ésta no sobrepasa el 5%.

En cuanto a las otras densidades, para  $8.5 \times 10^{-3} \rho/\text{\AA}$ , como ya veíamos antes, aquí tampoco se aprecia un cambio importante en la estructura del fluido, sino tan sólo una atenuación de la correlación como cabía esperar de una disminución en la densidad

Como hecho significativo, a la densidad  $11.74 \times 10^{-3} \rho/\text{\AA}$ , cabe

Fig. 1.32.- Variación con la distancia del tanto por ciento de pares de moléculas para las configuraciones angulares ( $\theta_1$ ,  $\theta_2$ ,  $\psi$ ) que más predominan en la estructura obtenida para el  $\text{CS}_2$  líquido mediante el modelo de potencial empleado en el caso II a la densidad  $9.97 \times 10^{-3}$  part. $\text{\AA}^{-3}$ .

Fig. 1.33.- Idem que la 1.32, pero para el caso I a la densidad  $8.5 \times 10^{-3}$  part. $\text{\AA}^{-3}$ .

Fig. 1.34.- Idem que 1.32, para el caso VI a la densidad  $1.174 \times 10^{-2}$  part. $\text{\AA}^{-3}$ :

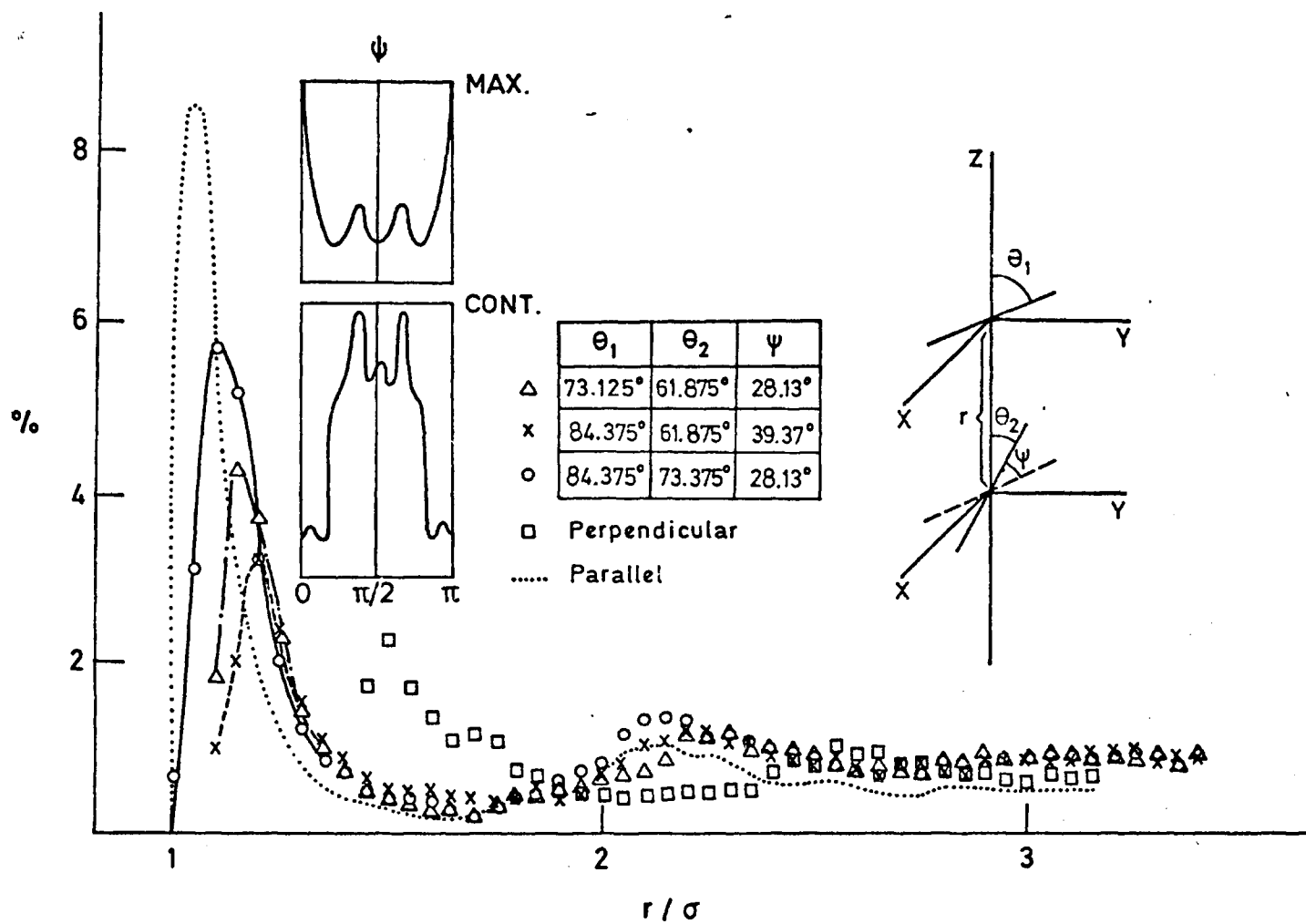


FIG. 1.32

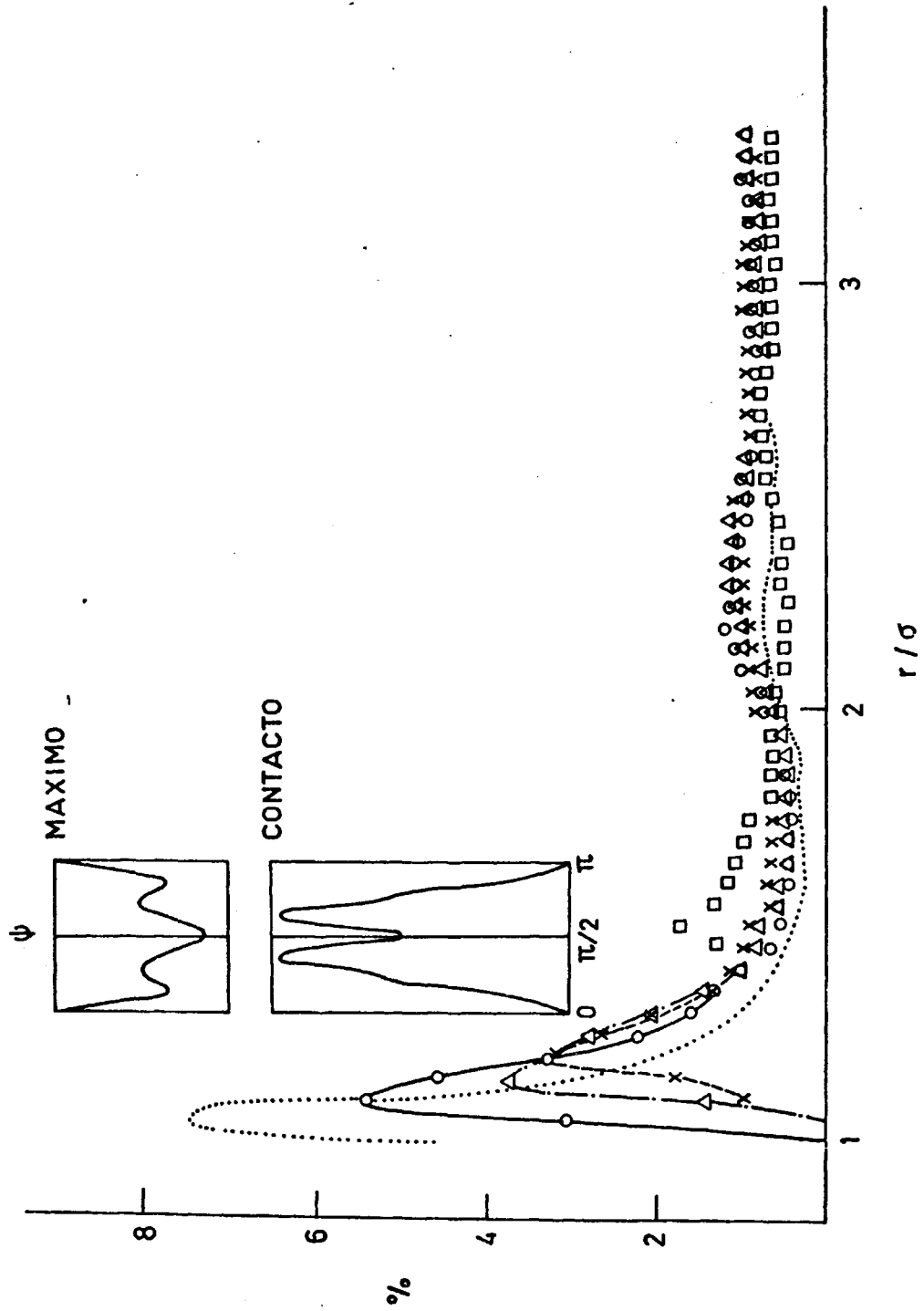


FIG. 1.33



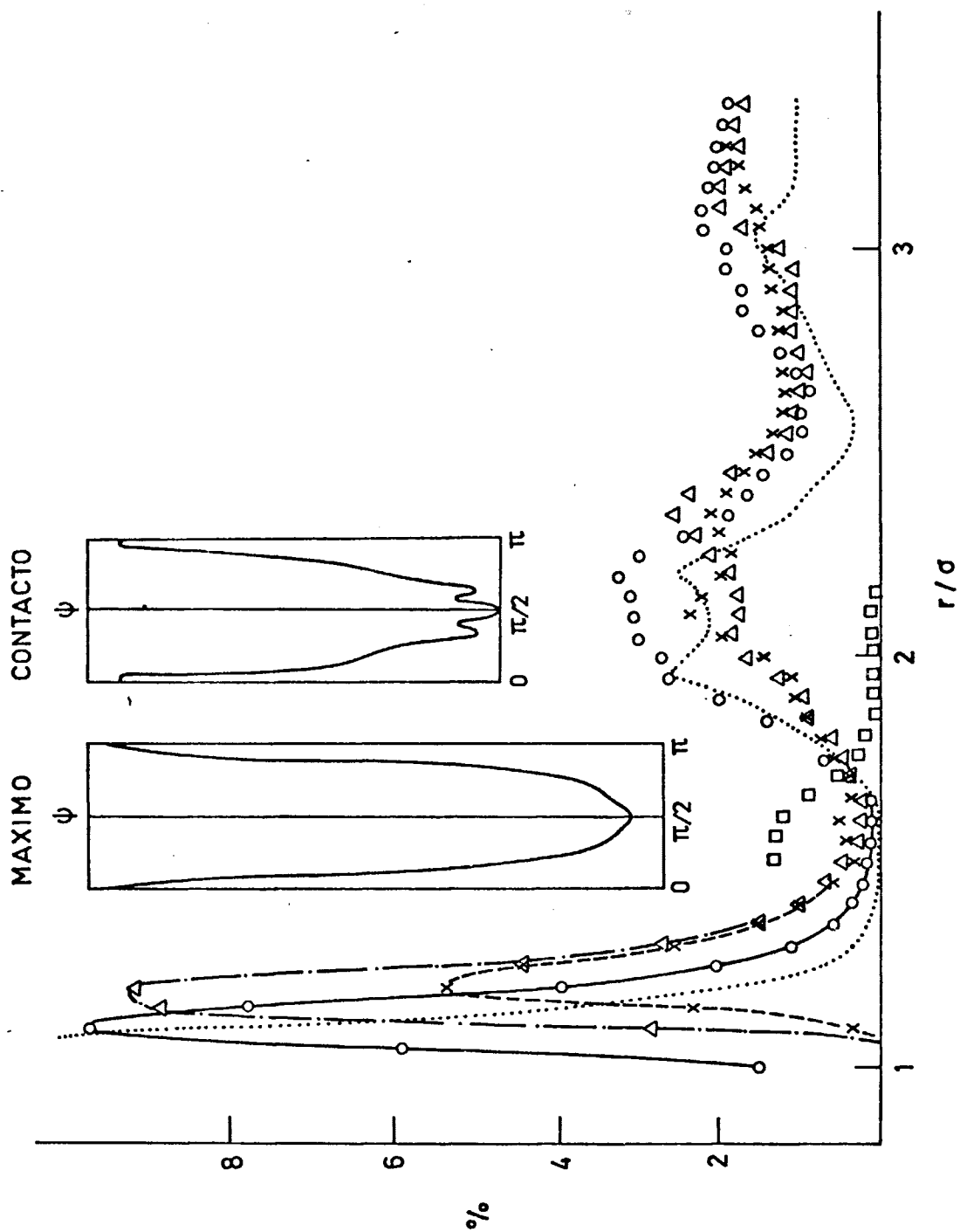


FIG. 1.34

destacar que, en términos relativos, la configuración en T prácticamente no se da, mientras que las configuraciones de partículas - con los ejes paralelos alcanzan porcentajes superiores a los casos anteriores, incluso en la segunda esfera de coordinación, para la que se observa un notable efecto de correlación de orientación. - También hay que hacer notar que aún cuando para  $\theta_1 = \theta_2 = \pi/2$  (paralela) a la distancia del máximo de la configuración paralela, la función de distribución molecular es máxima para  $\Psi = 0$ , como ocurría - con las otras dos densidades, a la distancia de contacto vuelve a ser máxima a  $\Psi = 0$  a diferencia del  $\Psi = 3\pi/8$  de los otros dos casos.

De estos resultados podemos deducir que se obtiene un empaque temiento más efectivo de las moléculas cuando éstas se encuentran aproximadamente paralelas que cuando adquieren conformación en T.

Por último, gracias a la función de distribución molecular se puede interpretar lo que antes llamábamos la estructura fina de - las funciones de distribución radial y que hasta ahora permanecía sin explicación.

En un principio se pensó que los hombros y picos secundarios se debían a la preponderancia en el líquido de una determinada - orientación relativa de las moléculas, e incluso basándose en ésto se trató de deducir cual era esta supuesta orientación. Posteriormente Street y Tildesley<sup>34</sup> calcularon de una forma aproximada la - función de distribución molecular, desarrollándola en serie de armónicos esféricos y obteniendo los coeficientes mediante una simulación por MC. Las conclusiones a que llegaron es que en el líquido  $\text{CS}_2$  no existe una configuración relativa entre pares de moléculas que predomine de una forma significativa sobre las demás, y - que, por tanto, ésta no puede ser la causa de la mencionada estructura fina. Nuestros resultados vienen a coincidir en este último - punto en cuanto que aunque sí aparece una ligera preferencia por - un grupo de configuraciones, como hemos visto antes, ésta no es suficiente para justificar la estructura fina. Pero es esta multipli

cidad de configuraciones la razón que permite explicar la estructura de las  $g_{\alpha\beta}(r)$ , ya que como se ve en las figuras 1.26 a 1.31, y tal como indicó ya Narten<sup>30</sup>, para cada una de las configuraciones el comportamiento de la función de distribución molecular respecto a la variable  $r$  es análoga al de las funciones de distribución radial, presentando dos máximos correspondientes a la primera y segunda capa de coordinación; no obstante, como puede verse en las mencionadas figuras 1.26 a 1.31, la localización de estos máximos sí es función de cada una de las configuraciones, por lo que al efectuar la superposición de estas configuraciones a la hora de obtener las funciones  $g_{\alpha\beta}(r)$ , no se encuentra un pico típico a una distancia dada, como ocurre con las funciones correspondientes a partículas de simetría esférica, sino una estructura compleja de hombros e incluso separación de picos secundarios.

Por lo tanto, podemos concluir que la estructura fina de las funciones de distribución radial no se debe tanto a la preponderancia de una determinada orientación relativa de las moléculas como a la diversa localización de los máximos para cada una de las configuraciones.

### 1.7.-Ecuación de estado

Los valores de la presión, factor de compresibilidad y compresibilidad isoterma obtenidos en los casos III, IV y V aparecen en la tabla 1.11.

La presión la hemos expresado como un polinomio de grado dos de la densidad, a partir de los datos de la Tabla 1.11, lo cual es una buena aproximación en el intervalo de densidades ( $0.997 \times 10^{-2}$ ,  $2.09 \times 10^{-2}$ ) en el cual los valores de la presión se alejan muy poco de una recta como puede verse en la figura 1.35, obteniendo la siguiente expresión:

$$P = 611774.34\rho^2 - 10488.95\rho + 48.6904 \quad (1.18)$$

Para obtener la compresibilidad isoterma basta derivar la ecuación anterior:

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial P}\right)_T = \frac{1}{1223548.68\rho - 10488.95} \quad (1.19)$$

Esta ecuación se encuentra representada con trazo continuo en la figura 1.35.

Con aproximadamente los mismos parámetros de potencial y a la primera de las densidades de la Tabla 1.11, Street y Tildesley<sup>34</sup> han calculado el valor del factor de compresibilidad obteniendo un valor de 12.84, que está en excelente concordancia con el calculado por nosotros.

Tabla 1.11.- Ecuación de estado y compresibilidad isoterma a tres densidades.

Densidad (Part./Å <sup>3</sup> )	P (atm.)	P/ρKT	∂ρ/∂P (atm <sup>-1</sup> Å <sup>-3</sup> )
0.997 x 10 <sup>-2</sup>	4.927	12.854	5.848 x 10 <sup>-4</sup>
1.05 x 10 <sup>-2</sup>	6.005	14.876	4.240 x 10 <sup>-4</sup>
1.09 x 10 <sup>-2</sup>	7.046	16.817	3.511 x 10 <sup>-4</sup>

Fig. 1.35.- En trazado discontinuo se representa la ecuación de estado obtenida para el modelo de esferas fusionadas con parámetros  $\sigma_{ss} = \sigma_{cc} = \sigma_{sc} = 3.4 \text{ \AA}$  y  $h = 1.55 \text{ \AA}$  a partir de los datos obtenidos en los casos III, IV y V (representados por  $\bigcirc$ ). En línea continua aparece la ecuación de compresibilidad isoterma que se deriva de la ecuación de estado anterior.

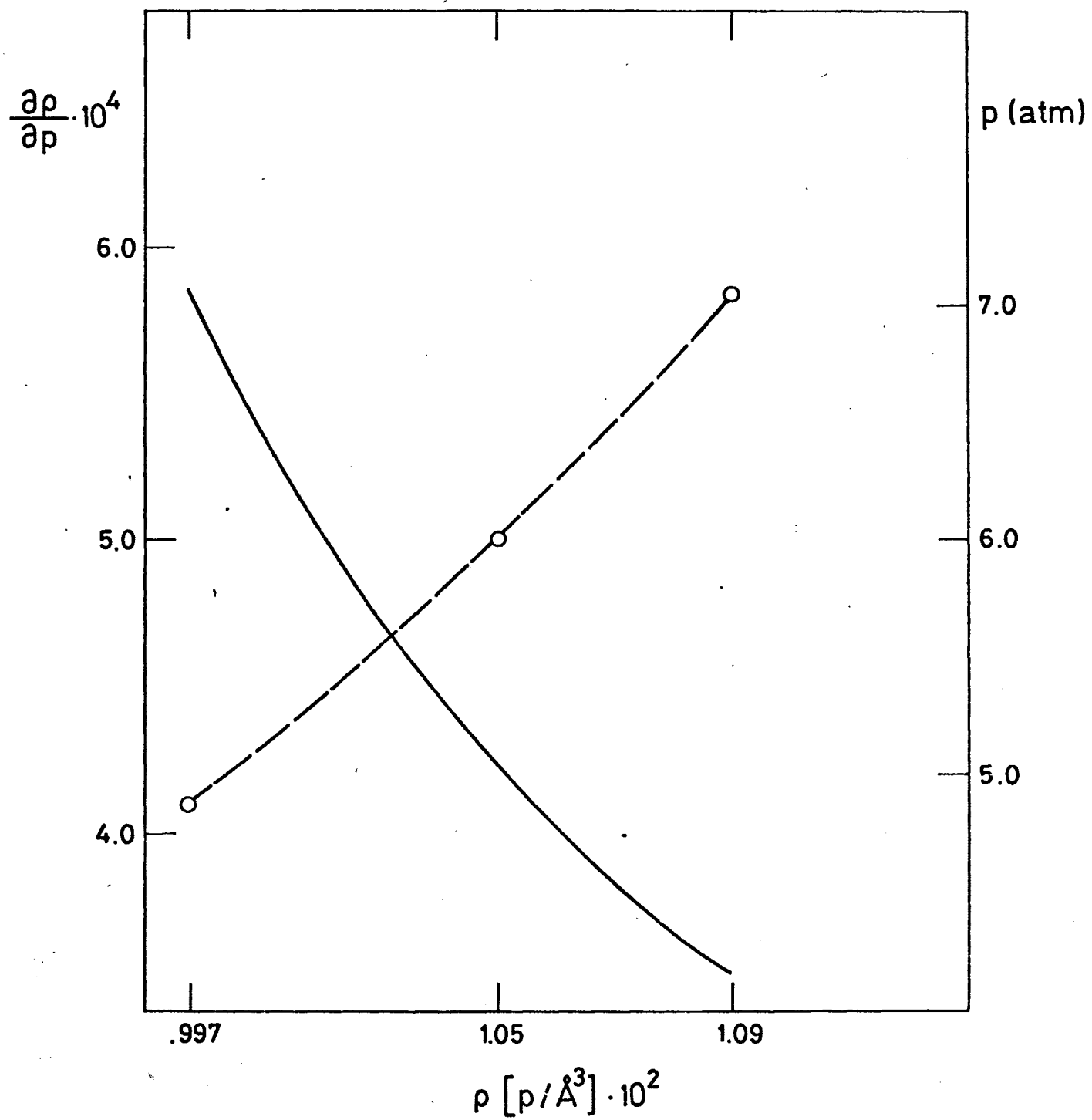


FIG. 1.35

## II.- SIMULACIONES CON POTENCIAL CONTINUO

## 2.1.-Introducción

En este capítulo se presentan las simulaciones por el método de MC para el fluido  $\text{CS}_2$ , considerando a las moléculas como tres centros que interaccionan mediante un potencial L-J 12:6

$$U_{\alpha\beta} = 4\epsilon_{\alpha\beta} \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r} \right)^6 \quad (2.1)$$

En todos los casos hemos empleado para los parámetros del potencial los mismos valores usados por Steinhauser en su simulación de éste mismo fluido por el método de DM y que han sido:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ss} &= 0.77 \text{ Kcal/mol} & \sigma_{ss} &= 3.30 \text{ \AA} \\ \epsilon_{cc} &= 0.06 \text{ Kcal/mol} & \sigma_{cc} &= 3.85 \text{ \AA} & h_{cs} &= 1.55 \text{ \AA} \\ \epsilon_{sc} &= 0.06 \text{ Kcal/mol} & \sigma_{sc} &= 4.00 \text{ \AA} \end{aligned}$$

Si bien este potencial se anula para  $r = \infty$ , es bien sabido que para una distancia  $r_c > 3\sigma$  se puede considerar despreciable, por lo que sólo se tienen en cuenta las interacciones entre centros que distan entre sí menos de un determinado radio de corte ( $r_c$ ). Nosotros hemos tomado  $r_c = 12.32 \text{ \AA} = 3.2\sigma_{cc} = 3.73\sigma_{ss} = 3.08\sigma_{cs}$ , y si tenemos en cuenta que las funciones de distribución centro-centro ( $g_{\alpha\beta}$ ) son aproximadamente iguales a uno para  $r > r_c$ , entonces se puede calcular la energía interna que se desprecia con esta elección de  $r_c$  según:

$$\Delta U = \sum_{\alpha\beta} \int_{r_c}^{\infty} g_{\alpha\beta} U_{\alpha\beta}(r) dr \approx \sum_{\alpha\beta} \int_{r_c}^{\infty} U_{\alpha\beta}(r) dr \quad (2.2)$$

Esta integral se puede efectuar analíticamente y con los valores anteriores de  $\sigma_{\alpha\beta}$  y  $\epsilon_{\alpha\beta}$  conduce a :



$$\frac{\Delta U}{N} = 0.001 \text{ Kcal/mol partícula}$$

Este valor, como veremos, es inferior al error que nosotros hemos estimado que afecta a los valores de  $\langle U \rangle$ ; lo cual justifica plenamente la elección de  $r_c$ .

En este punto hay que considerar que el modelo de potencial L-J entre partículas es un modelo suficiente para describir un líquido, sin necesidad de ninguna otra restricción adicional como ocurría en el caso de los potenciales rígidos, en los que hay que fijar la densidad, pero dado que en la práctica el tamaño de la muestra que es posible simular contiene un número relativamente pequeño de partículas, los efectos de la tensión superficial, como se ha comprobado repetidamente, son dominantes, y hay que recurrir al muy conocido artificio de las condiciones de contorno periódicas, que si bien eliminan dicho efecto, imponen a su vez a la muestra una densidad predeterminada, y pueden dar lugar a efectos espúreos, como ocurre cuando se elige el volumen demasiado grande, o lo que es lo mismo, se toman los parámetros de potencial de dimensiones longitudinales, tal como  $\sigma$  o  $l$ , pequeños; en este caso, que es precisamente el que resulta de la elección de dichos parámetros hecha por Steinhauser, se obtienen valores negativos para la presión, como veremos más adelante.

Las curvas de potencial resultantes para tales parámetros, aparecen en la figura 1.2, ya explicada en el capítulo I.

La energía potencial del sistema se obtiene mediante la clásica aproximación par-aditiva

$$\langle U \rangle = \frac{1}{2} \langle \sum_i \sum_j \sum_\alpha \sum_\beta U_{\alpha\beta} \rangle \quad (2.3)$$

Donde  $\langle \rangle$  indican valores promedios sobre todas las configuraciones de la cadena.

Asimismo, para todas las simulaciones, la densidad se ha fijado como  $9.97 \times 10^{-3} / \text{\AA}^3$ , y se ha tomado una muestra de 216 partículas.

## 2.2.-Método

A diferencia del capítulo primero, en que se obtenía una cadena de configuraciones independientes, aquí hemos seguido el método inicialmente utilizado por Metrópolis, y que es un criterio de importancia que como se dijo, permite realizar el muestreo en la zona de configuraciones con mayor probabilidad.

En cuanto a la forma de generar la configuración "n+1" a partir de la "n", hemos seguido dos técnicas diferentes. Para un primer conjunto de simulaciones se pasa de una configuración a la siguiente mediante el movimiento, en traslación y rotación, al azar, de una sola partícula; mientras que para un segundo bloque se ha estudiado el movimiento simultáneo de varias partículas, por lo cual hemos dividido el capítulo en las dos secciones:

- Cálculos con movimientos singulares.
- Cálculos con movimientos simultáneos.

## 2.3.-Magnitudes calculadas

Se han obtenido valores para las siguientes magnitudes del sistema:

Propiedades termodinámicas:

*\*Energía interna  $\langle U \rangle$ .*

Como hemos dicho anteriormente, su valor viene dado por:

$$\langle U \rangle = \left\langle \sum_{i,j,\alpha,\beta} U_{\alpha\beta} \right\rangle \quad (2.3)$$

*\*Calor específico a volumen constante  $C_v$ .*

Se ha evaluado como:

$$C_v = \frac{\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2}{KT^2} \quad (2.4)$$

Así como a través de las variaciones de  $\langle U \rangle$  con la temperatura:

$$C_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_v \quad (2.5)$$

*\*Presión.*

A partir del teorema del Virial, la presión se calcula - de acuerdo con la expresión siguiente:

$$P = \rho KT + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i < j} \vec{F}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} \right\rangle \quad (2.6)$$

Donde  $\langle \dots \rangle$  indica el valor promedio sobre todas las configuraciones aceptadas.

Dado que  $\vec{F} = -\partial U / \partial \vec{r}$ , y  $\vec{F}_{ij} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \vec{F}_{\alpha\beta}$ , y considerando que el potencial de interacción entre centros  $(\alpha\beta)$  es el L-J 12:6, se llega a que:

$$(F_{ij})_x = 24 \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \epsilon_{\alpha\beta} \left\{ 2 \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r_{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r_{\alpha\beta}} \right)^6 \right\} \frac{(r_{\alpha\beta})_x}{r_{\alpha\beta}^2}$$

$$\text{Haciendo } A_{\alpha\beta} = \left\{ 2 \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r_{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r_{\alpha\beta}} \right)^6 \right\}$$

$$\vec{r}_{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta} \vec{i} + Y_{\alpha\beta} \vec{j} + Z_{\alpha\beta} \vec{k}$$

$$\vec{r}_{ij} = X_{ij} \vec{i} + Y_{ij} \vec{j} + Z_{ij} \vec{k}$$

se obtiene:

$$P = \rho KT + \frac{24}{3V} \left\{ \sum_{i < j} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \epsilon_{\alpha\beta} \frac{A_{\alpha\beta}}{r_{\alpha\beta}^2} |X_{\alpha\beta} X_{ij} + Y_{\alpha\beta} Y_{ij} + Z_{\alpha\beta} Z_{ij}| \right\}$$

$$P = \rho KT + \frac{8}{V} \left\{ \sum_{i < j, \alpha, \beta} \epsilon_{\alpha\beta} \frac{A_{\alpha\beta}}{r_{\alpha\beta}^2} \vec{r}_{\alpha\beta} \cdot \vec{r}_{ij} \right\}$$

### Propiedades estructurales:

\**Función de distribución molecular*,  $g(r, \theta_1, \theta_2, \psi) \equiv g(r, \Omega_1, \Omega_2)$ . El cálculo se hace exactamente igual que en el caso del potencial rígido, como allí se indicó.

\**Función de distribución de los centros de masas*,  $g_{cc}(r)$ .

Se obtiene por integración sobre la parte angular de  $g(r, \Omega_1, \Omega_2, )$

$$g_{cc}(r) = \int g(r, \Omega_1, \Omega_2) d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (2.7)$$

como también se detalló en el capítulo I.

Los valores de las magnitudes se han obtenido como promedios sobre todas y cada una de las configuraciones que constituyen la cadena de simulación generada a partir de una configuración termalizada; en el caso de las magnitudes estructurales, estos promedio son a su vez sobre los promedios de las N funciones que se obtienen por cada configuración.

### 2.4.-Cálculo con movimientos singulares

Al igual que en las simulaciones con potenciales rígidos, es necesario generar una primera cadena, partiendo de una configuración cristalina para las partículas, hasta conseguir la termaliza-

ción. Para este potencial se considera alcanzado este punto cuando los promedios de la energía interna en sucesivas fracciones de la cadena comienzan a fluctuar respecto del promedio que se obtiene - con toda la cadena.

En la figura 2.1, que corresponde a una simulación a 298°K - partiendo de una configuración de las partículas en los nudos de - una red cúbica simple; se representan los promedios de la energía interna sobre fracciones de 10000 ciclos, frente al número total de ciclos generados. De ésta se observa que, aproximadamente desde los 200000 ciclos se puede considerar termalizado el sistema, y - desde este punto se puede comenzar el cálculo de magnitudes.

Una cadena típica sobre la que se han efectuado dichos cálculos es la de la figura 2.2. La temperatura es de 290°K y además de los promedios parciales de la energía interna, aparecen los promedios sobre el total de configuraciones de la propia energía interna y del calor específico a volumen constante.

En esta sección se han efectuado un total de cuatro simulaciones. En las tres primeras de ellas se ha calculado  $\langle U \rangle$  y  $C_v$  a una temperatura distinta en cada caso, y los resultados aparecen en la tabla 2.1. Como cota del error hemos empleado la diferencia entre los promedios resultantes a 200000 y 400000 ciclos.

Tabla 2.1.- Simulaciones

T(°K)	Energía por partícula $\langle U \rangle / N$ Kcal/mol	Capacidad calorífica Kcal/mol°K		N ciclos
		$C_v$	$C'_v$	
282	-7.735 ± 0.006	1.06 ± 0.1		400000
290	-7.698 ± 0.007	0.99 ± 0.06	0.98 ± 0.3	400000
298	-7.669	0.94	0.79	200000

Figura 2.1.- En línea discontinua se representa los promedios de la energía interna sobre fracciones de 10000 ciclos frente al número total de ciclos generados. El trazado continuo - corresponde al promedio de la energía interna pero sobre todos los ciclos generados. Ambas para el modelo de potencial utilizado en este capítulo a  $298^{\circ}\text{K}$ .

Figura 2.2.- Los datos representados en esta figura corresponden a la cadena generada a  $290^{\circ}\text{K}$  a partir de una configuración termalizada a esta misma temperatura. En ella aparecen los promedios parciales y totales de la energía interna, así como los totales del - calor específico.

72.5

$$T = 298 \text{ K}$$
$$\rho = 9.97 \cdot 10^{-3} \text{ p/\AA}^3$$

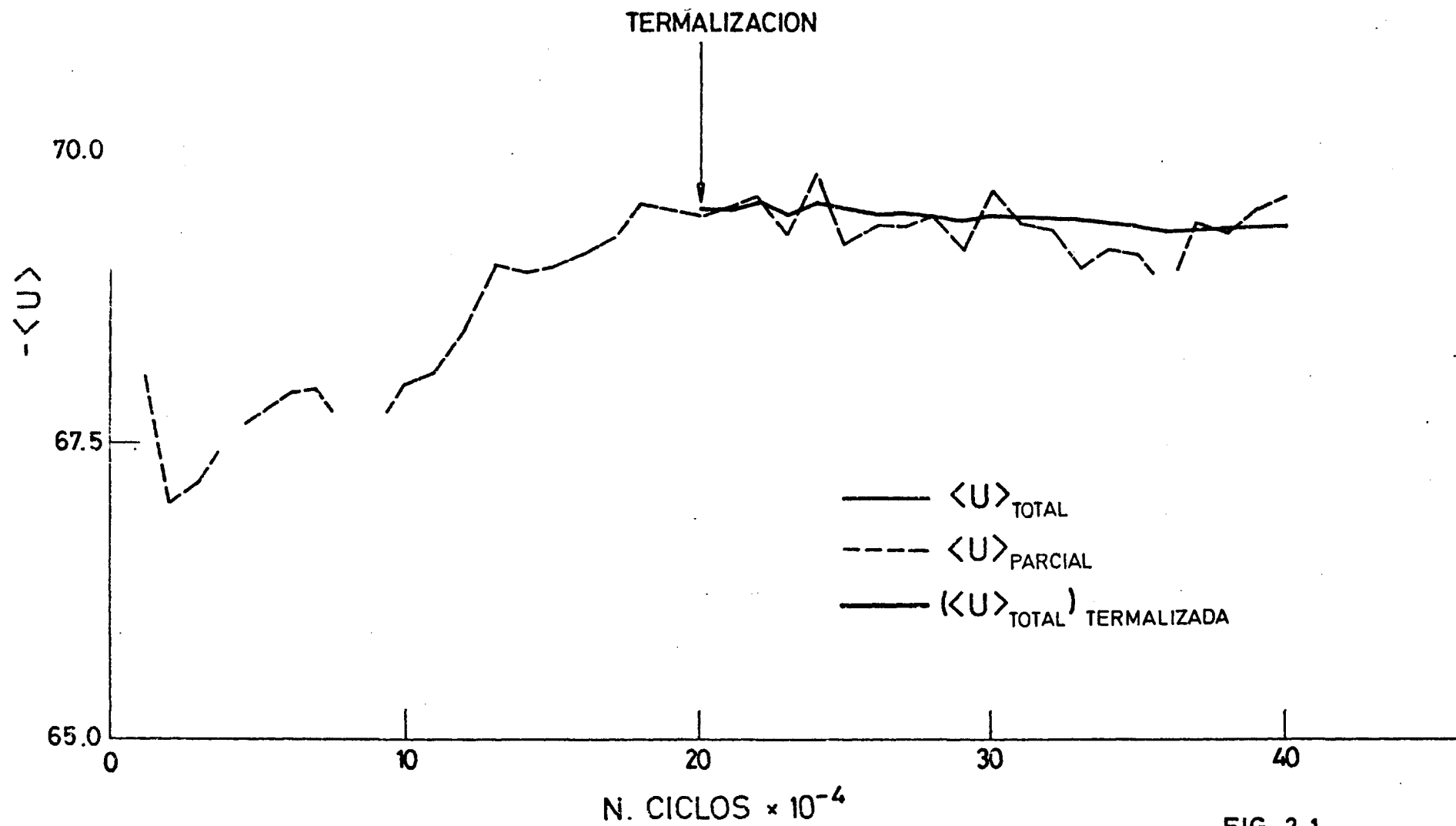


FIG. 2.1

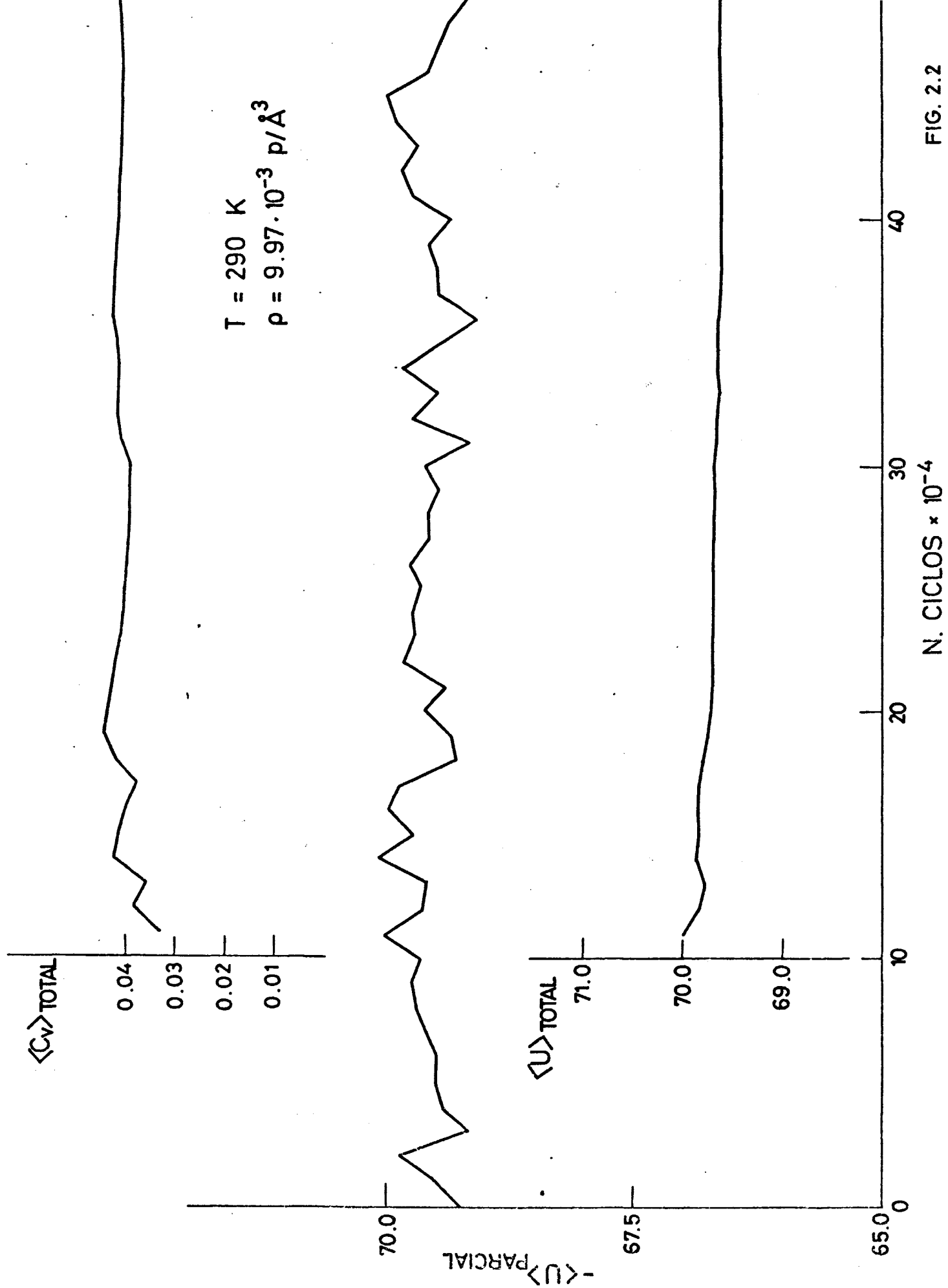


FIG. 2.2



$C_v$  se obtiene a partir de (2.4) y  $C'_v$  de (2.5).

Si bien  $C'_v$  viene afectado de un error importante, el acuerdo entre éste y  $C_v$  para 282°K y 290°K es razonablemente bueno, dada la gran dificultad que existe para evaluar esta magnitud por métodos de simulación. Las discordancias de los resultados para 298°K pueden atribuirse a que la simulación sólo se ha extendido hasta 200000 ciclos, que aunque son suficientes para obtener  $\langle U \rangle$  no lo son para evaluar el calor específico.

La cuarta simulación, efectuada a 282°K, consta de 300000 configuraciones, de las que se han obtenido la energía interna, presión, función de distribución molecular y función de distribución radial de los centros de masas. Las condiciones del fluido son equivalentes a las empleadas por Steinhauser<sup>35</sup> en su simulación por DM, pero en su caso sólo efectuó el cálculo de la energía interna y las funciones de distribución radial entre centros.

Una descripción del programa de cálculo que hemos empleado en esta simulación aparece en el Apéndice B.

La Tabla 2.2 resume los valores obtenidos para las propiedades termodinámicas junto a los obtenidos por Steinhauser<sup>35</sup> y por Tildesley<sup>47</sup>, ambos por DM.

Tabla 2.2.- Valores de magnitudes termodinámicas obtenidos por simulación.

	MC	Steinhauser <sup>35</sup>	Tildesley <sup>47</sup>
T°K	282	282.16	282
P/pKT	-3.58	-	-4.36
$\langle U \rangle / N (\text{Kcal/mol.part.})$	-7.73	-7.5	-7.61

En primer lugar se observa que el valor de  $\langle U \rangle / N$  de MC es el mismo que aparece en la tabla 2.1, correspondiente a una de las si

mulaciones anteriores a la misma temperatura, debiendo hacerse - constar que ambas se han llevado a cabo de una forma independien- te y a partir de configuraciones iniciales diferentes.

Por otra parte se encuentra un desacuerdo entre nuestro re- sultado para  $\langle U \rangle$  y el de Steinhauser del 3%, así como del 1.5% - comparado con el de Tildesley. Aunque en la referencia 35 se uti- lizó un radio de corte de  $10 \text{ \AA}$ , la contribución a la energía in- terna por partícula entre estos  $10 \text{ \AA}$  y nuestros  $12.32 \text{ \AA}$  es de só- lo  $0.001 \text{ Kcal/mol.part.}$ , que no justifica de ningún modo la dis- crepancia que por tanto hay que atribuir a la diferencia de méto- dos.

El hecho de obtener un valor negativo para  $P/\rho KT$  indica que los parámetros de potencial no son los más adecuados, especialmen- te los valores de  $\sigma_{\alpha\beta}$ , que deberían ser algo mayores; no obstan- te, se pueden considerar validos, pues es sabido que pequeñas va- riaciones en el parámetro  $\sigma$  producen grandes variaciones en  $P/\rho KT$  y el dato  $-3.58$  es un valor razonablemente pequeño.

Como se ve en la Tabla 2.2, el valor hallado por Tildesley - para  $P/\rho KT$  es asimismo negativo, aunque difiere sensiblemente del nuestro; para explicar esta diferencia hay que tener en cuenta - que los métodos de DM y MC no son exactamente equivalentes, ya - que mientras el primero mantiene constante la energía total del - sistema permitiendo fluctuaciones en la temperatura, el MC traba- ja con esta última variable fija, y naturalmente la presión a una temperatura dada no coincide con el valor medio de la presión a - una serie de temperaturas, aunque la media de éstas últimas coin- cida con aquella, y eso es lo que se hace precisamente en las si- mulaciones por DM. Además, hay que considerar que en DM las fuer- zas entre partículas, las cuales influyen directamente en la pre- sión, tienen una influencia explícita en la evolución de la mues- tra simulada, y por tanto en las configuraciones sobre las que se han de extender los promedios, y esto no ocurre en el método MC,

cabiendo esperar que, por tanto, los valores obtenidos para la presión por este último método sean superiores a los de DM como ocurre en este caso, en que  $P/pKT$  es menos negativo. Este mismo hecho se nos presentará en el tercer capítulo, en que obtendremos en dos ocasiones valores menores para la presión, al utilizar los datos obtenidos por MC, frente a los hallados por Tildesley mediante DM<sup>47</sup>.

En la figura 2.3 aparecen las funciones de distribución radial entre centros de masas, o lo que es lo mismo, entre los núcleos de carbono, obtenidas por nosotros con MC y las de Steinhauser<sup>35</sup> por DM. El acuerdo es total salvo en el intervalo (3.8-5.2 Å) en que, como se observa, nuestra función presenta más acusado el hombro en la parte izquierda del primer pico.

Tildesley<sup>47</sup> ha calculado asimismo por DM la función  $g_{cc}$  para este mismo modelo de potencial y en las mismas condiciones que Steinhauser y nosotros, mostrando sus resultados, al igual que los nuestros, más acusado el hombro que en la referencia 35.

El resultado global de estas tres comparaciones es que la descripción dada por Steinhauser corresponde a un fluido menos ordenado como dan cuenta un valor menos negativo de la energía interna y una estructura menos diferenciada en el primer pico de  $g_{cc}$ . Esto mismo se puede interpretar como una diferencia en la temperatura, resultando como si para Steinhauser fuese más alta que para Tildesley y MC. En el caso de la comparación MC y referencia 47, los resultados de  $g_{cc}$  y de la presión indican una estructura más **ordenada** para el fluido simulado por DM como cabía esperar, puesto que, como ya hemos dicho, este método tiene en cuenta de una forma explícita las fuerzas actuantes entre partículas.

En cuanto a la función de distribución molecular,  $g(r, \theta_1, \theta_2, \Psi)$ , en las figuras 2.4-2.9 aparecen representados los tantos por cientos de moléculas que se encuentran en cada una de las configu-

Figura 2.3.- Función de distribución radial entre centros de masas, o lo que es lo mismo, entre núcleos de carbonos. En trazo continuo la obtenida por Steinhauser por DM, y como  $\circ$  la obtenida por nosotros mediante MC.

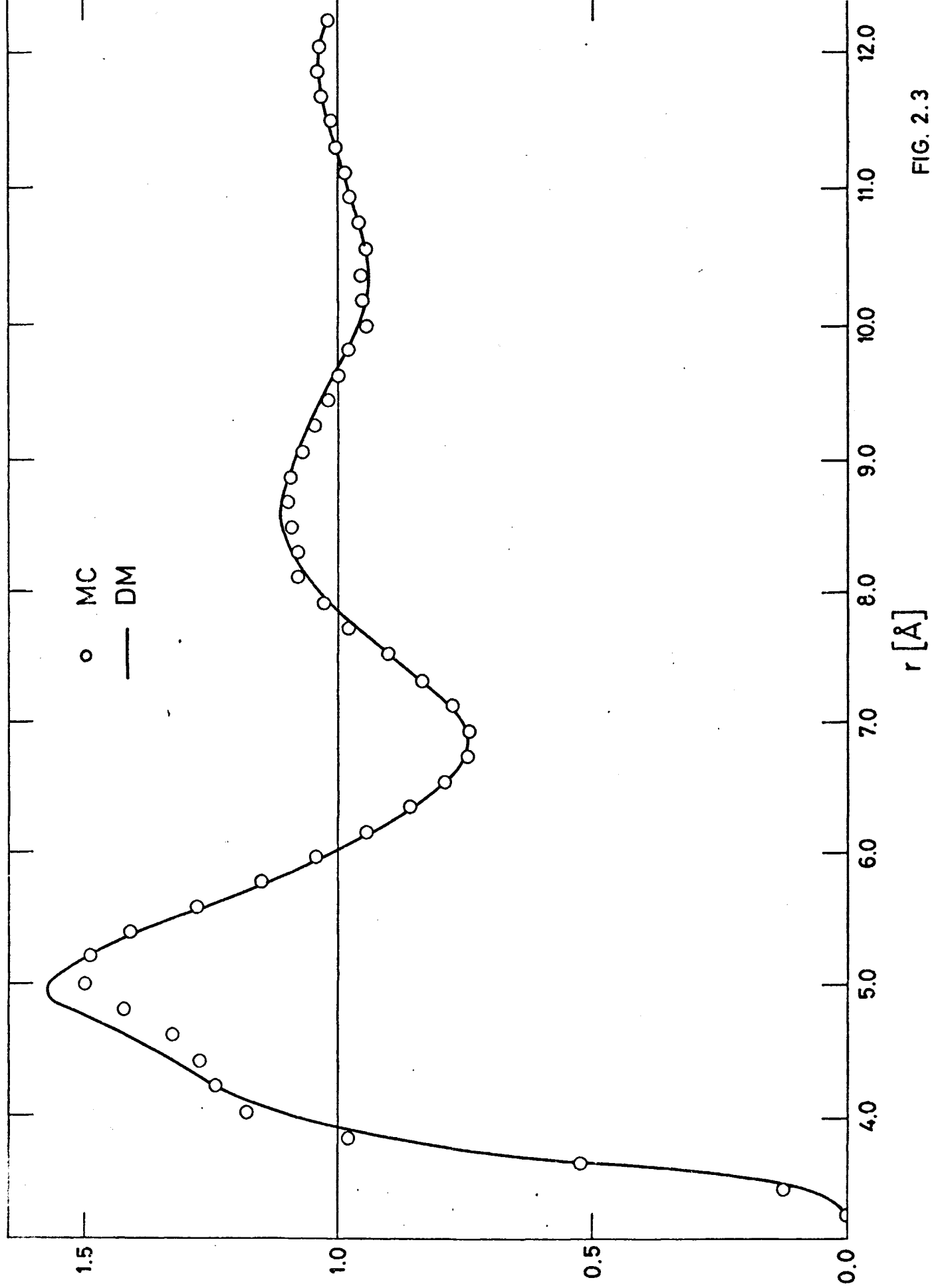


FIG. 2.3

Figuras 2.4 a 2.9.- Representan los tantos por cientos de moléculas que se encuentran en cada una de las configuraciones angulares a cada distancia, de igual forma a como se hizo en el capítulo primero para las figuras 1.26 a 1.31, con las que se corresponden en terminología directamente, por lo que aquí no la repetimos.

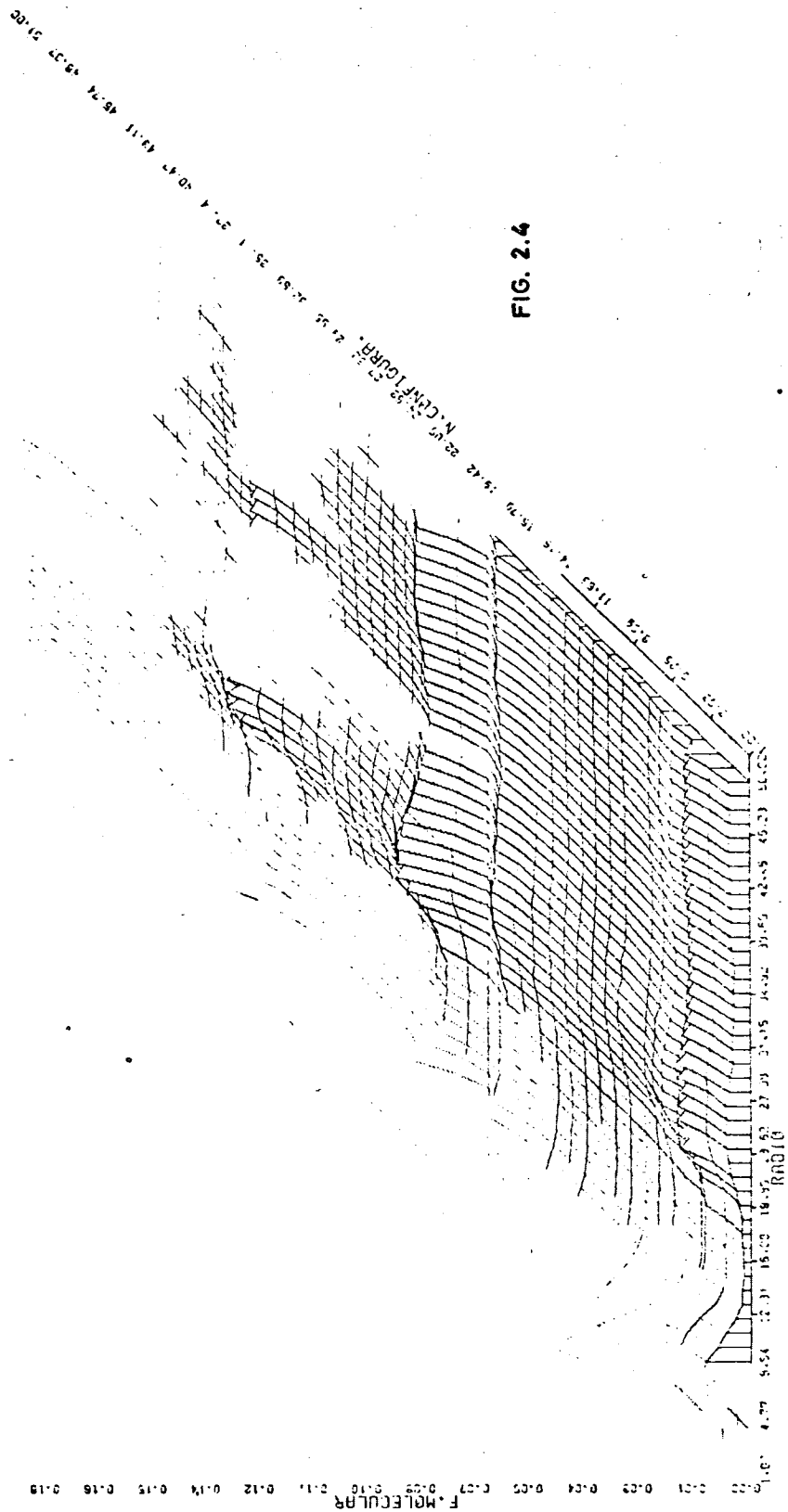
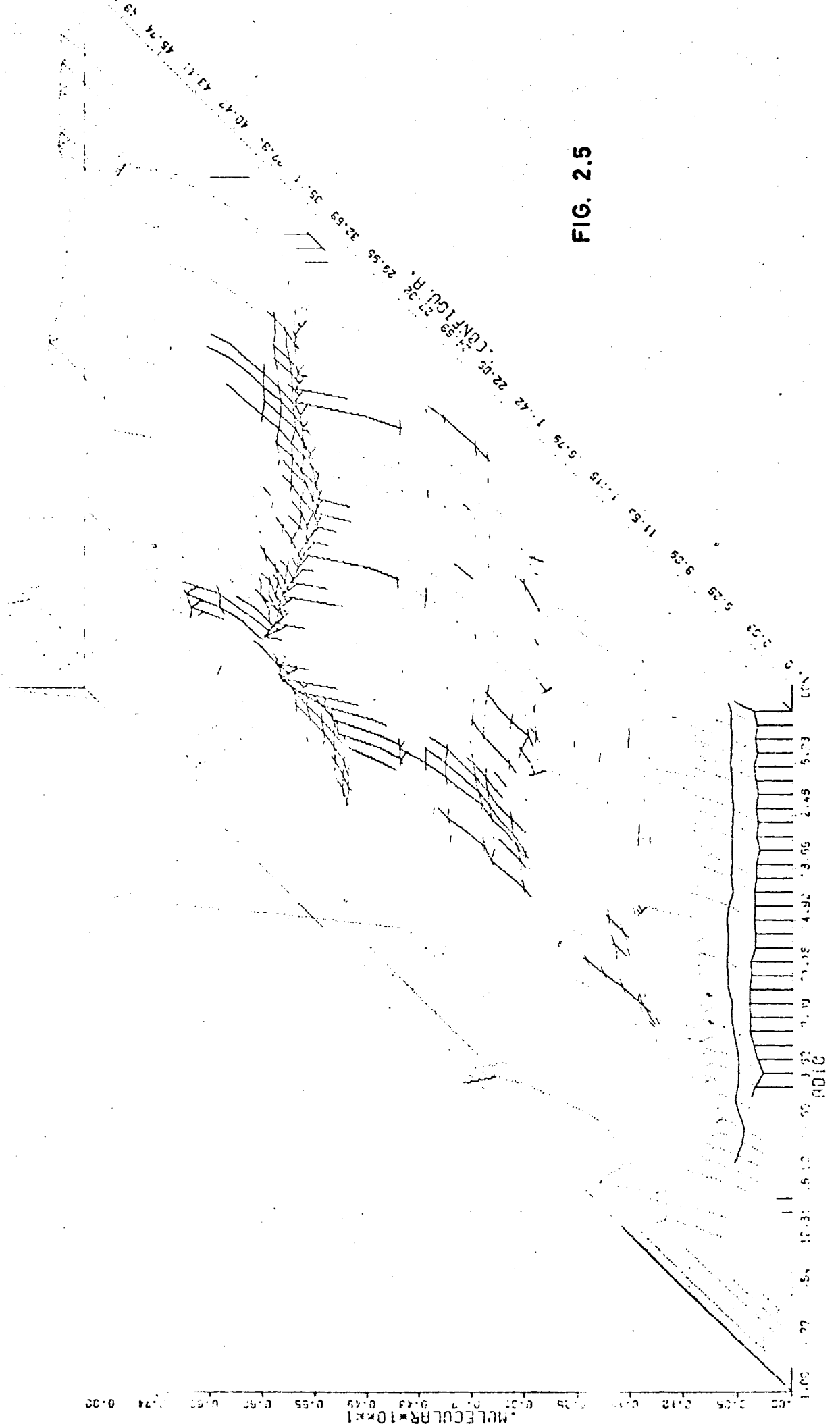
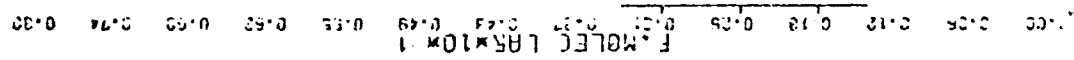


FIG. 2.4





**FIG. 2.6**



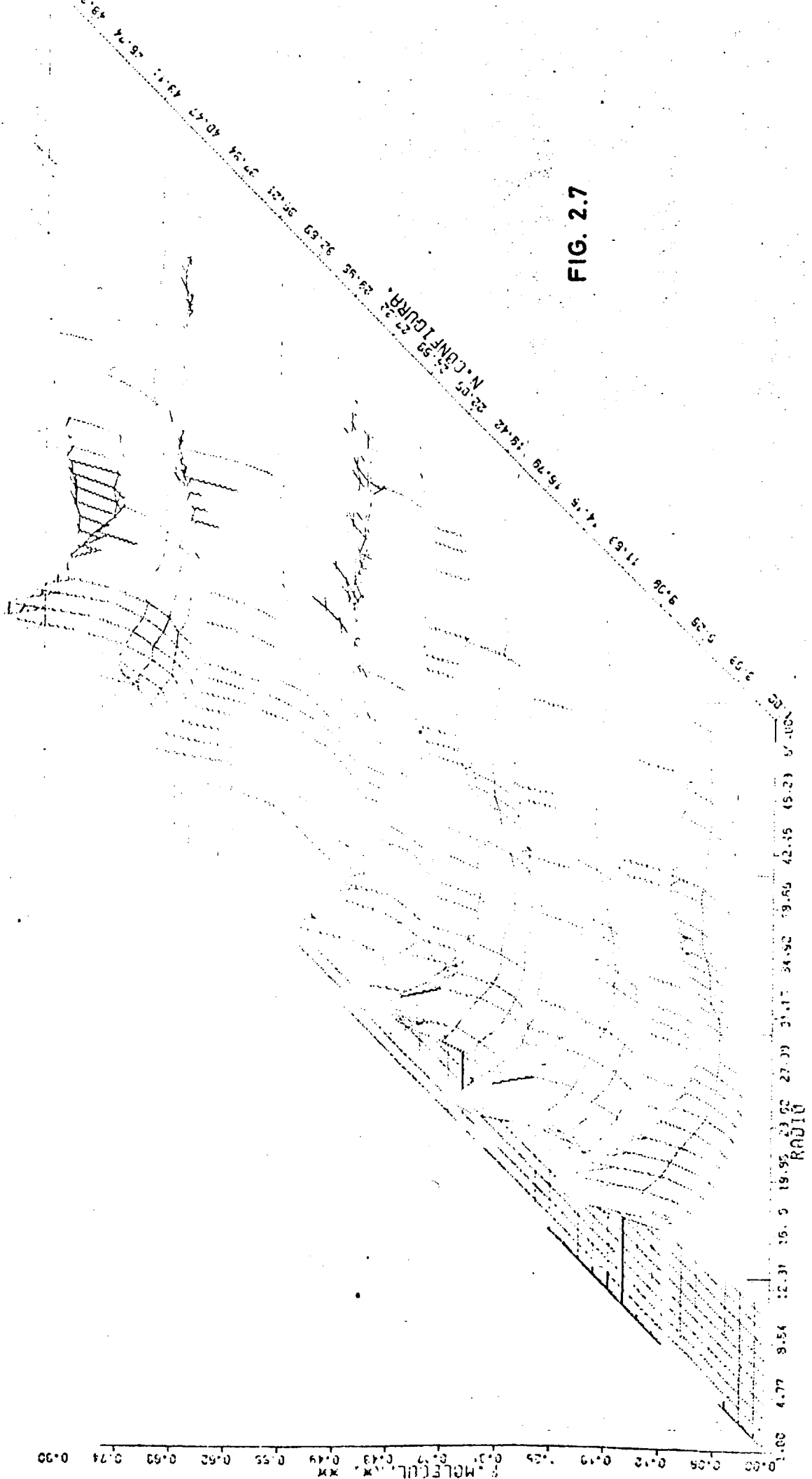
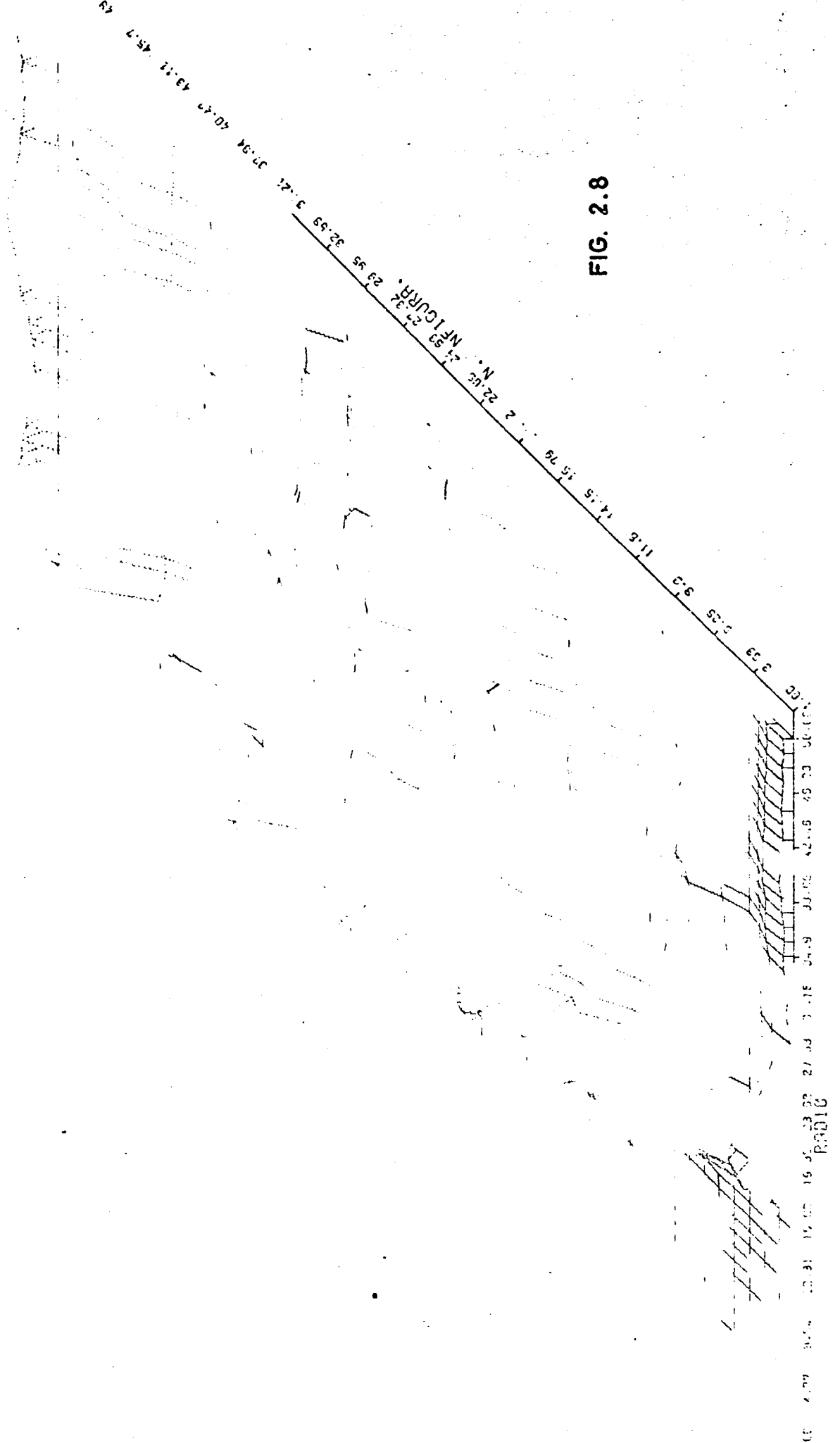
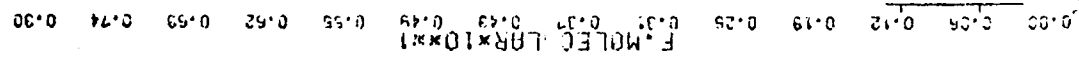


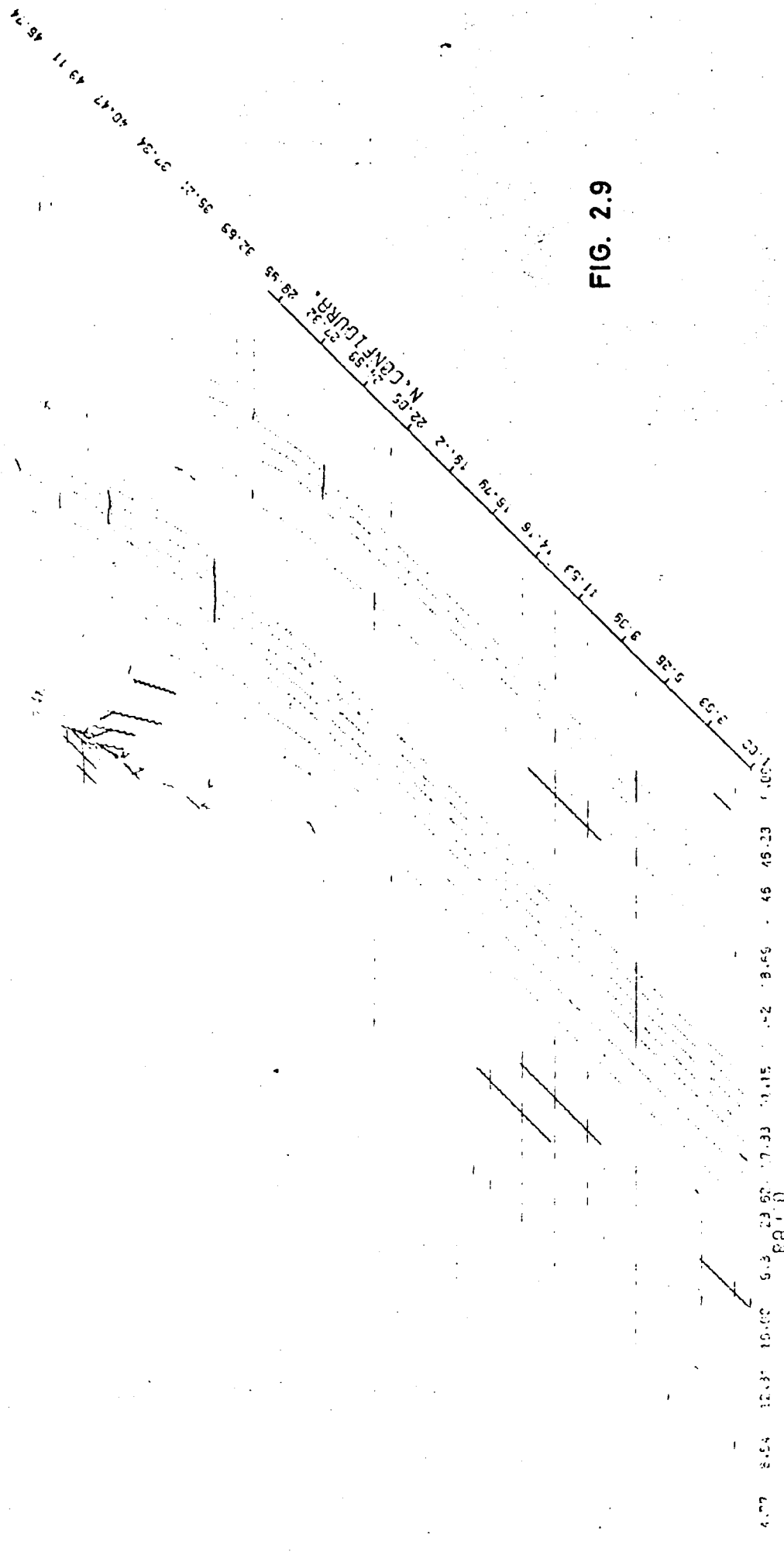
FIG. 2.7

F.M.C. CULR.  $\times 10^{-1}$  0.00 0.05 0.10 0.15 0.20 0.25 0.30 0.35 0.40 0.45 0.50 0.55 0.60 0.65 0.70 0.75 0.80 0.85 0.90 0.95 1.00





**FIG. 2.9**



raciones a cada distancia, de igual forma a como se hizo en el primer capítulo, con la única diferencia de que el rango de variación de la distancia entre centros de masas varia de 2.887 Å a 12.320 Å a intervalos de 0.1925 Å.

De la comparación de estas figuras con las del capítulo primero lo que se puede destacar es que, como cabía esperar de los resultados para las funciones de distribución radial entre centros, la concordancia es muy acusada; sólo a las distancias de contacto aparecen algunos desacuerdos, como puede ser la magnitud del primer pico en la conformación  $\theta_1 = \theta_2 = 84.4$  y  $\Psi = 84.4$  que alcanza casi un 18%; sin embargo, si nos fijamos en los valores para el número absoluto de moléculas en este pico que aparece en el Apéndice C, veremos que es realmente muy pequeño y por tanto pesa poco en la estructura total del fluido. La explicación de este elevado valor en el tanto por ciento es muy sencilla, y a la vez interesante, puesto que dicha conformación es la que corresponde a dos moléculas en planos distintos y con sus ejes perpendiculares, para la cual las cuatro distancias entre centros S son iguales a 3.63 Å, que coincide prácticamente con los 3.70 Å, que es la distancia del mínimo del potencial de interacción entre dichos centros S, y que como hemos mencionado repetidamente, son las interacciones netamente dominantes del fluido. Cualquier variación del ángulo  $\Psi$  entre los ejes moleculares que se aparte de los  $\pi/2$  radianes conduce rápidamente a interacciones repulsivas entre átomos de azufre, y de esto se sigue que para esta distancia del máximo entre los centros de masas, las partículas se presentan masivamente con sus ejes perpendiculares. Esto se refleja en la abrupta caída del máximo en su entorno de configuraciones que representan la variación del ángulo  $\Psi$  así como el elevado valor del 18%. Por otra parte, se viene a corroborar la decisiva influencia de las interacciones SS en la estructura del fluido, que como se puede ver de esta configuración en partículas, fuerzan a los centros C a aproximarse a distancias de hasta 2.9 Å, las cuales, considerando el valor para  $\sigma_{cc}$  de 3.85 Å, corresponden a la zona repulsiva interna de la interacción C-C.

Salvo esta pequeña discrepancia y algunas otras del mismo carácter y de escasa significancia en la estructura total del fluido, podemos concluir que la función de distribución molecular obtenida con el potencial L-J es básicamente idéntica a la obtenida en el capítulo primero, por lo que no volveremos a repetir aquí las implicaciones estructurales que ya desarrollamos allí. Baste sin más con hacer hincapié en lo adecuado que resulta el modelo rígido con densidad prefijada para la descripción de la estructura del  $\text{CS}_2$  si consideramos que la descripción de éste por el modelo tricéntrico de interacciones es suficientemente realista.

## 2.5.-Cálculo con movimientos múltiples

El origen de este estudio se encuentra en el trabajo de Rossky y otros<sup>46</sup>, en que desarrollan un nuevo procedimiento de simulación por MC destinado a obtener una convergencia más rápida que la del método de Metrópolis. Los movimientos de las partículas destinados a generar la siguiente configuración se realizan de acuerdo con un algoritmo de dinámica browniana, en vez de al azar, y además se producen movimientos simultáneos de varias partículas, cosa que hasta entonces no se había realizado o al menos no tenemos conocimiento de ello, y que desde entonces no se ha vuelto a considerar. Es en este último aspecto en el que estamos interesados.

Entre las conclusiones de aquel estudio se hizo notar que en ciertas situaciones donde la velocidad de convergencia viene determinada por las posibilidades del método para escapar a situaciones metaestables, como son los mínimos locales de la energía, el método no era efectivo. A altas densidades el sistema es fácilmente atrapado en estos estados metaestables, precisamente por las consideraciones dinámicas en los desplazamientos de las partículas tendentes a generar la cadena.

Para intentar salvar esta dificultad nosotros hemos vuelto a adoptar la técnica de movimientos al azar, pero manteniendo el movimiento simultáneo de varias partículas.

El primer resultado que obtuvimos es que si se desplaza una gran parte de las moléculas que componen el sistema, y se utilizan desplazamientos medios del mismo orden que los empleados en la sección precedente, no se acepta prácticamente ninguna configuración.

De varios intentos en una muestra de 216 partículas en las que variamos el número de partículas a mover y el valor de los mencionados desplazamientos medios, sólo se consiguió una relación entre configuraciones aceptadas y generadas comprendida entre 0.3 y 0.5 para los casos que aparecen en la Tabla 2.3. En esta aparecen también los valores resultantes para la presión, energía interna y calor específico a volumen constante. Las condiciones del fluido son las mismas que las de la cuarta simulación de la sección anterior.

Tabla 2.3.- Magnitudes termodinámicas a partir de movimientos múltiples

N part. a mover	Desplazamiento medio	Conf.acept. Conf.gener.	$\frac{\langle P \rangle}{\rho kT}$	$\langle U \rangle / N$ Kcal/mol.part.	$C_v$ Kcal/mol $^{\circ}K$	N ciclos
30	0.040	0.312	-3.34	-7.740	0.20	1000
28	0.035	0.391	-3.07	-7.704	0.06	5000

Asimismo se ha obtenido las funciones de distribución de los centros de masas que aparecen en la figura 2.10, junto a la obtenida en la sección precedente.

Se observa que los valores obtenidos para  $\langle U \rangle$  y  $P/\rho kT$  coinci

Fig. 2.10.- Funciones de distribución radial entre centros de masas, obtenidas mediante movimientos múltiples. Los  $\square$  corresponden a una simulación de 1000 ciclos y 30 movimientos simultáneos. Los  $\circ$  se refieren al cálculo con 5000 ciclos y 28 movimientos, mientras que en trazo continuo aparece la obtenida mediante movimientos singulares.



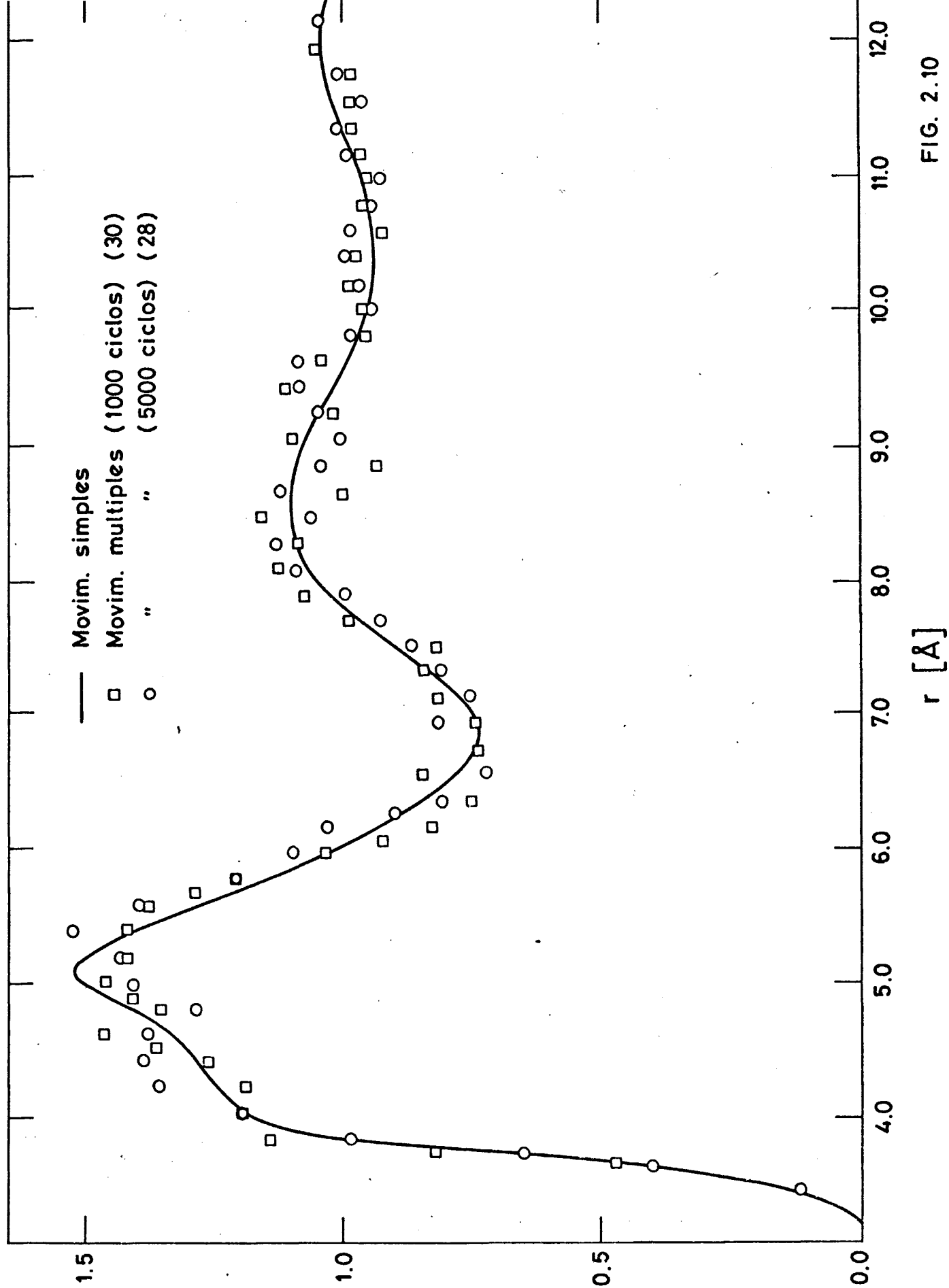


FIG. 2.10

den razonablemente con los hallados anteriormente mediante movimientos singulares, por el contrario la función de distribución, aparte de un hábito análogo y una localización aproximada de los picos, no puede considerarse satisfactoria, y con respecto al calor específico a volumen constante, los resultados carecen de significado como valores para esta propiedad del sistema, pero son interesantes por cuanto muestran lo sensible que es esta magnitud a factores inherentes al método como es la velocidad de aceptación y que obligan a realizar simulaciones extraordinariamente largas para eliminarlas. Como es natural, una cadena en que se aceptan pocas configuraciones y para la que se usa el criterio de Metrópolis, repite mucho estas pocas aceptadas, lo que se traduce en fluctuaciones mínimas de la energía, y de aquí valores anómalamente pequeños de  $C_v$ .

Si bien no hemos realizado un análisis exhaustivo en cuanto al número de partículas a mover y los parámetros de desplazamiento a elegir, y por lo tanto no podemos establecer conclusiones definitivas, los resultados que hemos obtenido y los tiempos de cálculo que ha sido necesario emplear en ellos nos llevan a considerar que el método no es realmente eficiente y sobre todo que no es capaz de vencer la dificultad básica del método inicial de Rossky<sup>46</sup>, de caer con facilidad en estados metaestables, pues si bien el suprimir las consideraciones dinámicas en los desplazamientos de las partículas no restringe al sistema en una zona del espacio fásico, los únicos valores en los parámetros de desplazamiento que conducen a velocidades de aceptación razonables son tan pequeños que la velocidad con que se recorre dicho espacio es muy pequeña y obliga a la generación de cadenas de un número de ciclos elevado, lo que acarrea el empleo de tiempos de cálculo que no son competitivos con los empleados en el método clásico de movimientos singulares.

### III.~ APLICACION A LA TEORIA DE PERTURBACIONES

### 3.1.-Introducción

A partir de un modelo de potencial rígido como el usado en el capítulo primero, se pueden obtener las propiedades termodinámicas de un sistema con interacciones de potencial tipo L-J (12:6), que hemos estudiado en el capítulo 2, a través de la teoría de perturbaciones B-H<sup>48</sup> ampliada para líquidos moleculares por Lombardero y colaboradores<sup>13</sup>. En esta teoría se hace un desarrollo serie de Taylor de dos variables,  $\alpha$  y  $\gamma$ , para la integral de configuración, -llegándose a la sobradamente conocida expresión de la energía de Hemholtz:

$$\begin{aligned} \frac{A}{NKT} = \frac{A_0}{NKT} - \sum_{ij} \alpha \, 2\pi\rho d^2 \, g_{ij}^0(d) \{d_{ij} - \int_0^{d_{ij}} |1 - e^{-\beta U_{ij}(z)}| dz + \\ \sum_{ij} \gamma 2\pi\rho\beta \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^0(r) U_{ij}(r) r^2 dr - \\ \sum_{ij} \pi\rho\beta \left(\frac{\partial\rho}{\partial P}\right)_0 \frac{\partial}{\partial\rho} \left(\rho \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^0(r) U_{ij}^2(r) r^2 dr\right) + \dots \end{aligned} \quad (3.1)$$

donde se ha usado la aproximación de la compresibilidad local para el término en  $\gamma^2$ . Los sumatorios se extienden a los distintos pares de centros de moléculas distintas.

Al elegir  $\alpha = \gamma = 1$  se tiene que  $A_0$ ,  $g^0$  y  $\left(\frac{\partial\rho}{\partial P}\right)_0$  corresponden a un sistema de moléculas interaccionando con un potencial de esferas fusionadas de diámetros  $d_{ij}$ .

La presión se deduce fácilmente de

$$P = - \left( \frac{\partial A}{\partial V} \right)_T \quad (3.2)$$

$$\frac{P}{\rho KT} = \left( \frac{P}{\rho KT} \right)_0 + \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{A}{NKT} - \frac{A_0}{NKT} \right) \quad (3.3)$$

En este capítulo hemos realizado en primer lugar el cálculo de  $P$  en un sistema equivalente al empleado en la cuarta simulación del capítulo anterior, empleando dos sistemas de referencia distintos, y a continuación, los mismos cálculos para otros dos sistemas con parámetros de potencial diferentes.

### 3.2.-Aproximación de la teoría de perturbaciones

Aquí vamos a interpretar el carácter físico de la aproximación a la energía libre por el desarrollo de la perturbación con sólo los términos de primer orden y con la elección del sistema de referencia por medio de la expresión:

$$d_{ij} = \int_0^{\sigma_{ij}} \frac{e^{-\beta U_{ij}(z)}}{1 - e^{-\beta U_{ij}(z)}} dz \quad (3.4)$$

que hasta ahora siempre se ha utilizado. Con este sistema de referencia se anula el término en  $\alpha$  y el desarrollo se reduce a:

$$\frac{A}{NKT} = \frac{A_0}{NKT} + \sum_{ij} 2\pi\rho\beta \int_0^{\infty} g_{ij}^0(r) U_{ij}(r) r^2 dr$$

Consideremos la energía Hemholtz de un sistema con interacciones L-J (12:6)

$$A = U - TS$$

Si  $g_{ij}(r)$  son las funciones de distribución radial de centros de dicho sistema, la energía interna se puede expresar como:

$$U = \sum_{ij} 2\pi\rho \int_0^{\infty} g_{ij}(r) U_{ij}(r) r^2 dr =$$

$$= \sum_{ij} 2\pi\rho \left[ \int_0^{\sigma_{ij}} g_{ij}(r) U_{ij}(r) r^2 dr + \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}(r) U_{ij}(r) r^2 dr \right]$$

En el sistema de referencia rígido

$$U_o = \sum_{ij} 2\pi\rho \left[ \int_0^{\sigma_{ij}} g_{ij}^o(r) U_{oij}(r) r^2 dr + \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^o(r) U_{oij}(r) r^2 dr \right]$$

donde  $g_{ij}^o(r)$  son ahora las funciones de distribución radial del sistema de referencia.

Sustituyendo  $U$  y  $U_o$  en la expresión:

$$A - A_o = U - U_o - (TS - TS_o) \quad , \text{ resulta:}$$

$$A = A_o - T(S - S_o) + 2\pi\rho \sum_{ij} \left[ \int_0^{\sigma_{ij}} \{g_{ij}(r) U_{ij}(r) - g_{ij}^o(r) U_{oij}(r)\} r^2 dr + \right.$$

$$\left. + \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} \{g_{ij}(r) U_{ij}(r) - g_{ij}^o(r) U_{oij}(r)\} r^2 dr \right]$$

Haciendo una primera aproximación

$$g(r) \approx g^o(r)$$

$$A = A_0 - T(S - S_0) + 2\pi\rho \sum_{ij} \int_0^{\sigma_{ij}} g_{ij}^0(r) \{U_{ij}(r) - U_{0ij}(r)\} r^2 dr + \\ + \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^0(r) \{U_{ij}(r) - U_{0ij}(r)\} r^2 dr$$

Puesto que

$$U_{0ij}(r) = \begin{cases} \infty & \text{si } r < d_{ij} \\ 0 & \text{si } r \geq d_{ij} \end{cases}$$

y, además, con la elección habitual  $d_{ij} < \sigma_{ij}$ , se llega a:

$$A = A_0 - T(S - S_0) + 2\pi\rho \sum_{ij} \int_{d_{ij}}^{\sigma_{ij}} g_{ij}^0(r) U_{ij}(r) r^2 dr + \\ + 2\pi\rho \sum_{ij} \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^0(r) U_{ij}(r) r^2 dr + \delta(d_{ij})$$

$\delta(d_{ij})$  es la contribución a la energía interna de la discontinuidad del potencial  $U_0(r)$ .

Introducimos una segunda aproximación al considerar que:

$$g^0(r) \approx 0 \quad \text{para } r \leq \sigma, \text{ con lo cual}$$

$$A = A_0 - T(S - S_0) + \delta(d_{ij}) + \sum_{ij} 2\pi\rho \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^0(r) U_{ij}(r) r^2 dr$$

Por ser  $g_{ij}(r) \approx g_{ij}^0(r)$  se tiene que  $S \approx S_0$  y despreciando  $\delta(d_{ij})$

$$A = A_0 + \sum_{ij} 2\pi\rho \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^0(r) U_{ij}(r) r^2 dr$$


---

que coincide con el desarrollo de la perturbación y por tanto las aproximaciones que nosotros hemos introducido son las que contiene implícitas este desarrollo. De ellas la más determinante es que  $-g^0(r) \approx g(r)$ , pues si ésta se cumple se sabe que las moléculas en el sistema L-J (12:6) para un estado líquido no poseen energía suficiente para acercarse a distancias menores que  $\sigma$  donde el potencial se hace positivo, y de hecho  $g(r)=0$ . Pero es esta misma razón la que limita la validez de la mencionada primera aproximación, ya que los parámetros de un potencial rígido efectivo  $d_{ij}$  que describan lo más aproximadamente la estructura del fluido L-J serán por tanto mayores que los correspondientes  $\sigma_{ij}$  como hemos visto en el capítulo primero, y esto resulta incompatible con la elección que se hace del modelo de referencia a través de (3.4). Por otra parte abandonar dicha elección, aparte de introducir en el desarrollo el término en  $\alpha$  que ahora no se anula y que es extraordinariamente difícil de calcular, no resuelve el problema si tenemos en cuenta - que por medio de potenciales rígidos aún las mejores funciones de distribución radial de centros discrepan seriamente de las correspondientes L-J en la zona próxima a  $d_{ij}$  y esta diferencia se produce en la zona que más contribuye al valor de la integral

$$\int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}(r) U_{ij}(r) r^2 dr \quad \text{en el caso que } d_{ij} > \sigma_{ij}$$

Esto no ocurre evidentemente cuando  $d_{ij} < \sigma_{ij}$ . La influencia concreta en los resultados de estas consideraciones se puede ver en los cálculos que hemos efectuado y que describimos a continuación en los apartados:

- Elección clásica del sistema de referencia.
- Sistema de referencia con parámetros realistas.

Independientemente de estas influencias de orden formal en la exactitud de los resultados, hay que añadir las precedentes del tratamiento numérico que es preciso realizar con los datos que ob-



tenemos de las simulaciones. La ecuación de la perturbación para la presión aún en la aproximación de primer orden, envuelve el cálculo de integrales y derivadas de funciones de las que sólo se dispone de una tabla de valores, lo que obliga a resolverlas numéricamente. En cuanto a las integrales se sabe que si se dispone de un número razonable de puntos, los resultados que se obtienen aplicando un método sencillo como es el de Simpson son bastante exactos, y como estas integrales se extienden sobre las funciones de distribución para las cuales, mediante la simulación, hemos obtenido tablas muy detalladas, no cabe esperar que se cometan errores importantes. Por el contrario en la evaluación de las derivadas respecto de la densidad no dispondremos de demasiados puntos, ya que cada uno de éstos exige una simulación específica, lo cual, unido a que los métodos numéricos de derivación son mucho menos exactos - que los de integración, nos ha obligado a extremar las precauciones a la hora de hallar dichas derivadas, las cuales siempre que - ha sido posible, hemos calculado por dos caminos distintos, tratando así de estimar el error que el cálculo numérico puede acarrear. Por un lado la técnica seguida ha consistido en representar los datos por polinomios y derivar éstos, y por otra parte, llegar a la derivada en un punto mediante la extrapolación de los cocientes incrementales  $\Delta Y/\Delta X$ . En general, podemos adelantar que se obtienen resultados bastante satisfactorios con dos o tres valores de  $\Delta X$  y sin necesidad de polinomios de grado mayor que dos, e incluso como ocurre en algunos casos, no resulta aconsejable el empleo de un - grado mayor aunque se disponga de los datos necesarios, como veremos posteriormente.

### 3.3.-Elección clásica del sistema de referencia

Como hemos dicho anteriormente, en todos los cálculos realizados hasta la fecha, los parámetros  $d_{ij}$  se han obtenido según:

$$d_{ij} = \int_0^{\sigma_{ij}} \{ 1 - e^{-\beta U_{ij}(z)} \} dz$$

$$\text{siendo } U_{ij} = 4\epsilon_{ij} \left\{ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right\}$$

En este apartado nosotros hemos procedido de igual forma y los valores que se obtienen usando los  $\epsilon_{ij}$  y los  $\sigma_{ij}$  dados en el capítulo II son los siguientes:

$$\begin{aligned} d_{ss} &= 3.22949 \text{ \AA} \\ d_{cc} &= 3.47354 \text{ \AA} \\ d_{sc} &= 3.60887 \text{ \AA} \end{aligned} \quad \text{para una temperatura de } 282.16^\circ\text{K}.$$

El modelo para la molécula de referencia aparece representado en la fig.3.1.

Con estos parámetros  $d_{ij}$  se han efectuado varias simulaciones a cuatro densidades por medio de las cuales hemos determinado las funciones de distribución radial  $g_{ij}^0(r)$  y los valores  $P_0$  necesarios en el desarrollo de la perturbación.

Las funciones  $g_{ij}^0$  aparecen en las figuras 3.2, 3.3, 3.4 y 3.5 y las características de estas simulaciones en las tablas 3.1 y 3.2.

Tabla 3.1.- Simulaciones efectuadas para el cálculo de  $g_{ij}^0$

Densidad	Nº de ciclos	Nº de partículas
$1.000 \times 10^{-2}$	$1.6 \times 10^6$	216
$1.025 \times 10^{-2}$	$1.0 \times 10^6$	216
$1.050 \times 10^{-2}$	$0.8 \times 10^6$	216
$1.100 \times 10^{-2}$	$0.8 \times 10^6$	216

Figura 3.1.- Modelo de potencial rígido para el sistema de referencia en la elección clásica de éste para la teoría de perturbaciones B-H.

MOLECULA DE REFERENCIA B-H  
PARA CS<sub>2</sub>

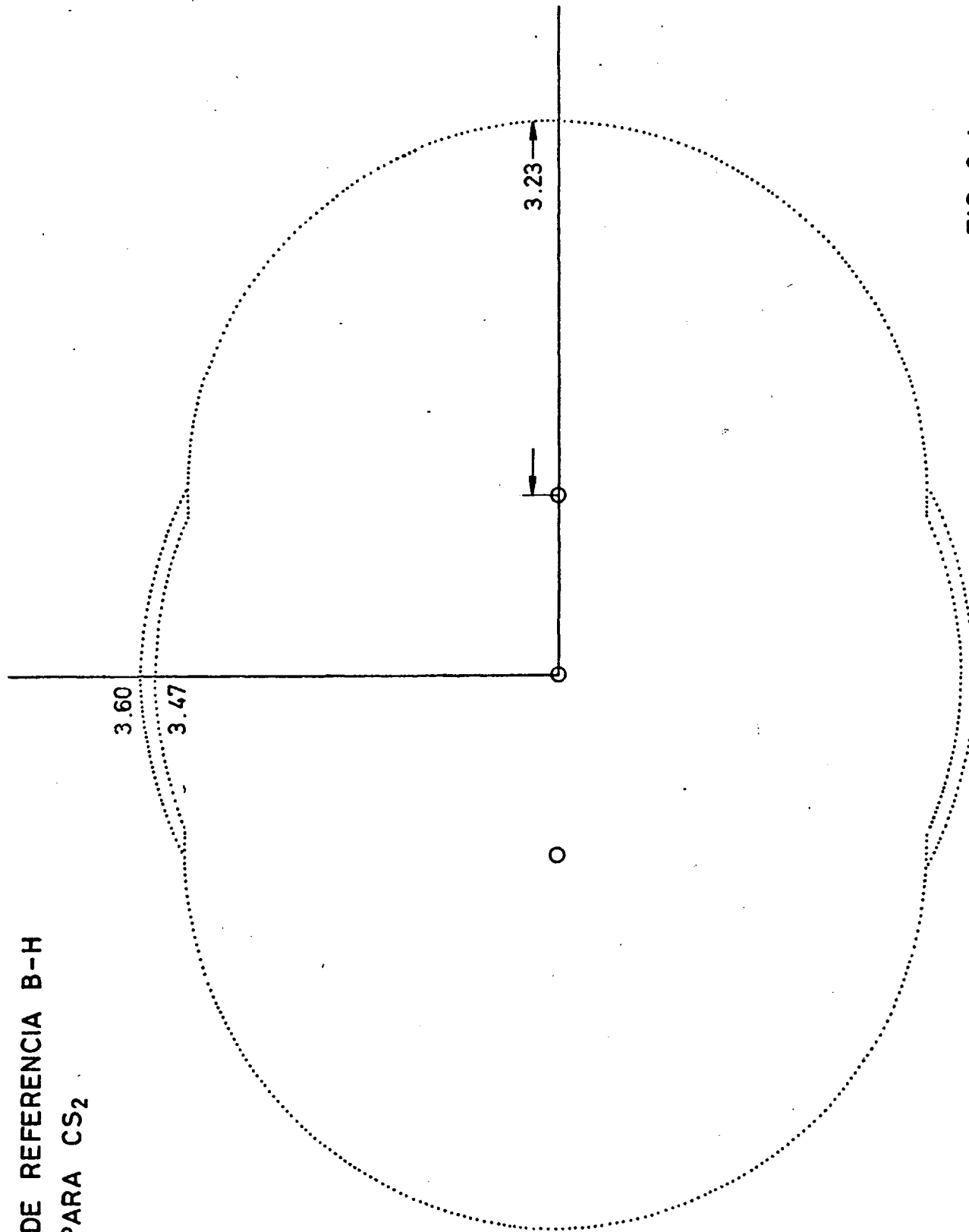


FIG. 3.1

Figura 3.2.- Funciones de distribución radial de centros para el sistema de referencia con parámetros  $d_{ss}=2.2295 \text{ \AA}$ ,  $d_{sc}=3.6089 \text{ \AA}$  y  $d_{cc}=3.4735 \text{ \AA}$  a la densidad  $1.0 \times 10^{-2}$  part.  $\text{\AA}^{-3}$ .

Figura 3.3.- Idem que la anterior a  $\rho = 1.025 \times 10^{-2}$  part.  $\text{\AA}^{-3}$ .

Figura 3.4.- Idem a  $\rho = 1.05 \times 10^{-2}$  part.  $\text{\AA}^{-3}$ .

Figura 3.5.- Idem a  $\rho = 1.1 \times 10^{-2}$  part.  $\text{\AA}^{-3}$ .

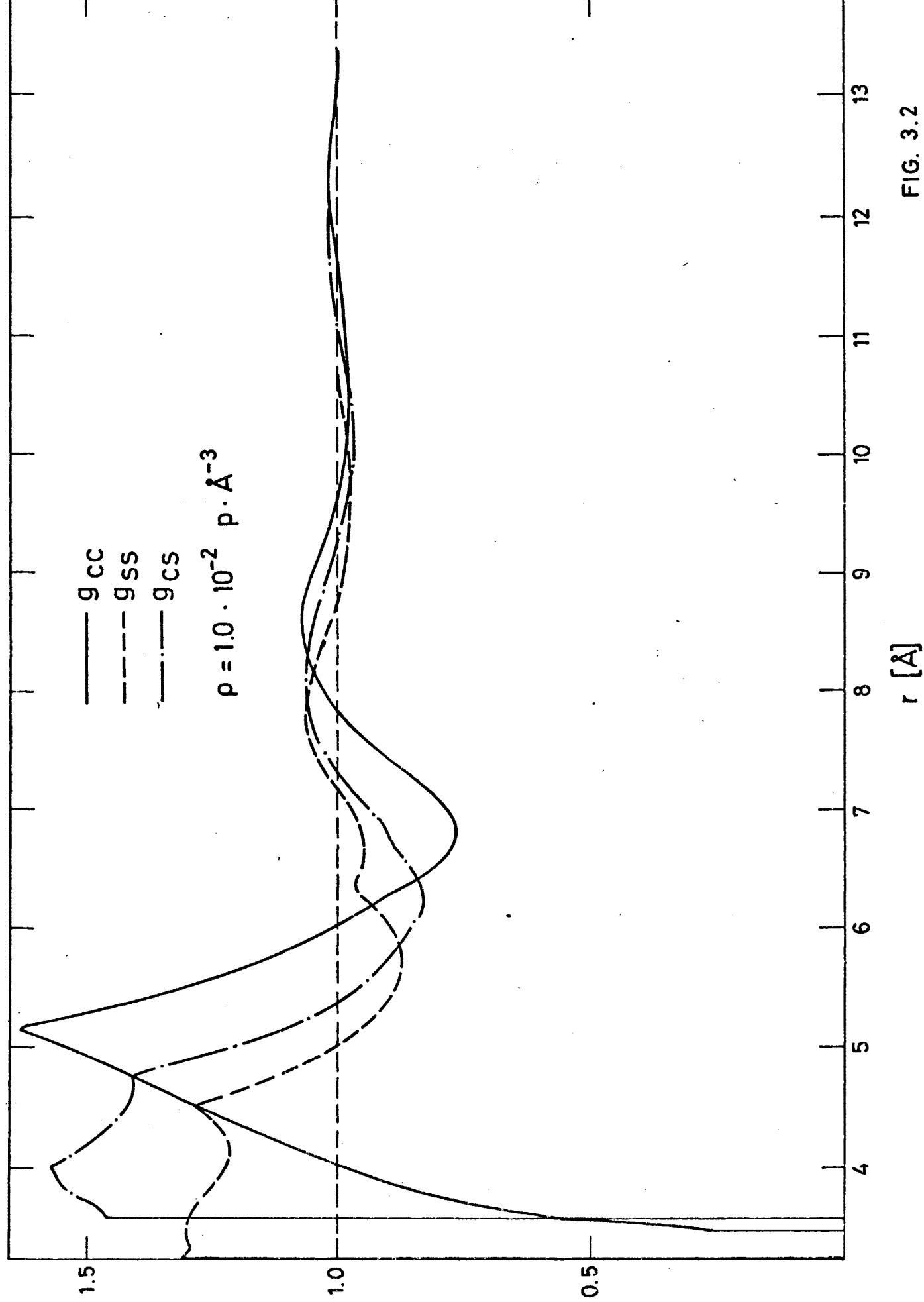


FIG. 3.2

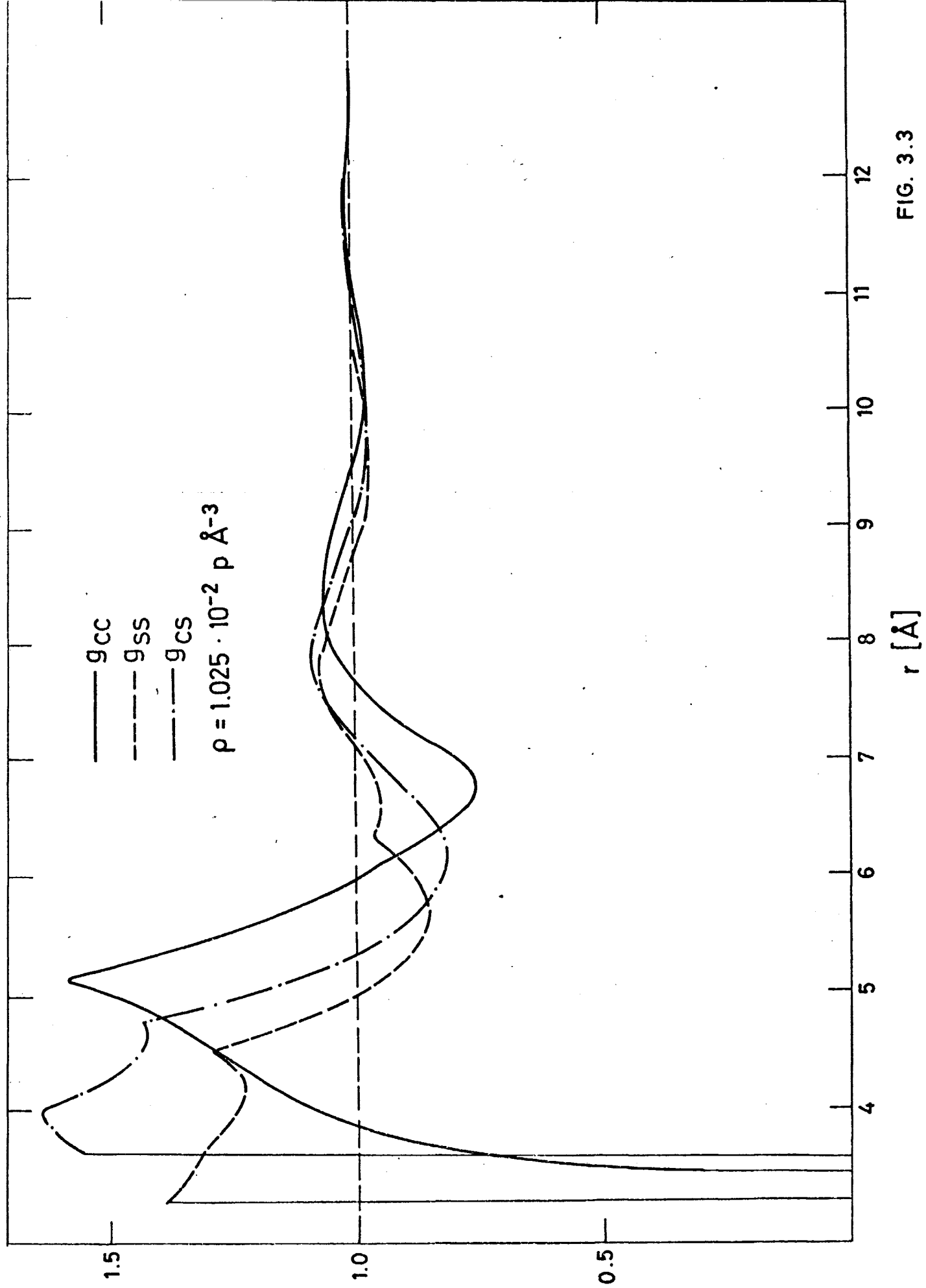


FIG. 3.3

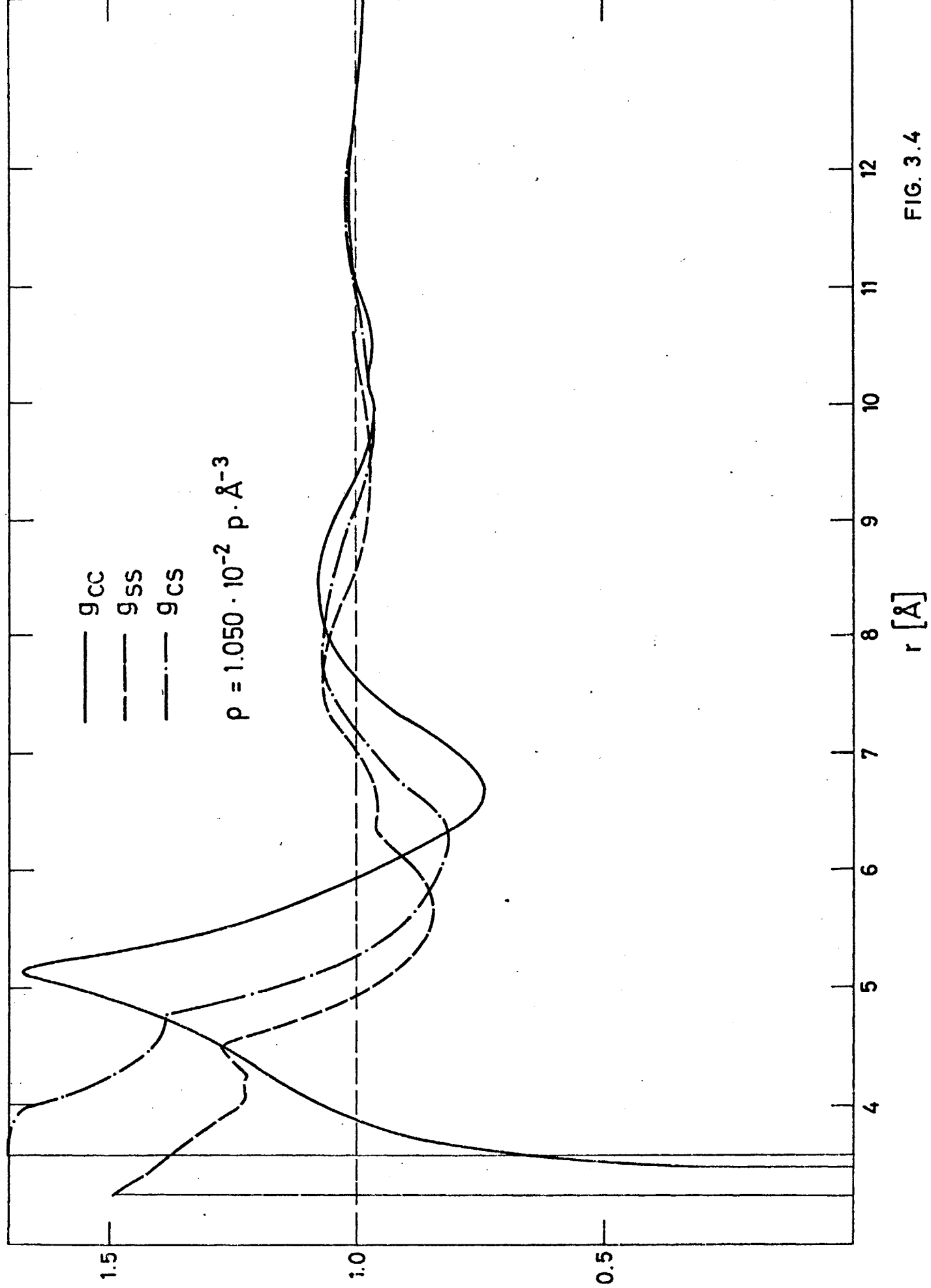


FIG. 3.4



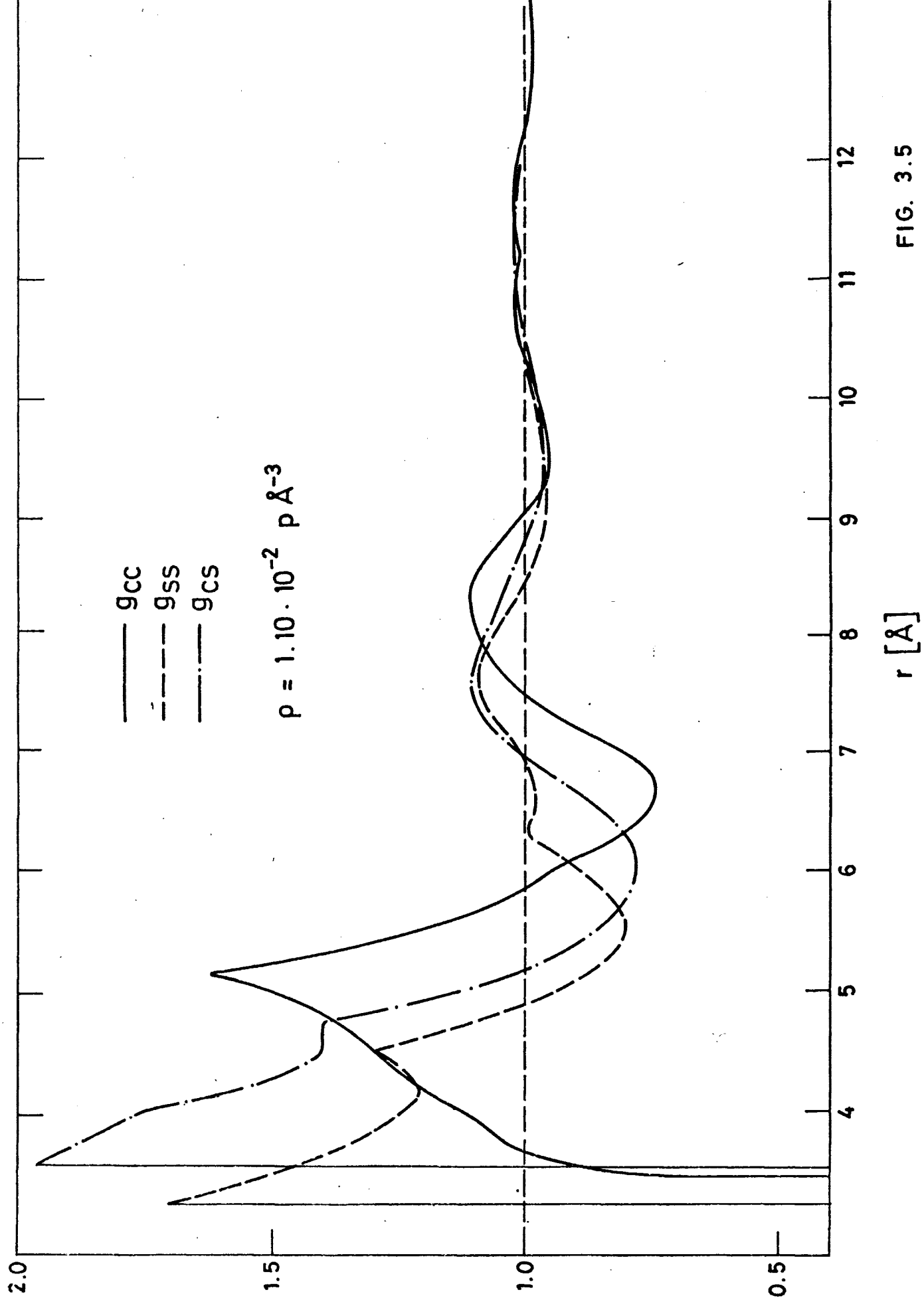


FIG. 3.5

Tabla 3.2.- Simulaciones efectuadas para el cálculo de  $P_0$ .

Densidad	Nº de ciclos	Nº de partículas
$1.000 \times 10^{-2}$	$3.2 \times 10^6$	216
$1.025 \times 10^{-2}$	$2.2 \times 10^6$	216
$1.050 \times 10^{-2}$	$2.0 \times 10^6$	216
$1.100 \times 10^{-2}$	$2.4 \times 10^6$	216

$P_0$  se ha calculado en cada caso por extrapolación con tres intervalos de igual forma que como se hizo en el capítulo primero. Los valores obtenidos se recogen en la tabla 3.3, y se hallan representados en la fig.3.6, junto a los ajustes polinómicos de grado tres (línea continua) y grado dos (línea punteada), que de estos datos hemos realizado. Se observa que estos dos ajustes son - prácticamente coincidentes, y si nos hemos decidido a utilizar en los cálculos posteriores el de grado dos es porque, al disponer de tan sólo cuatro puntos, el polinomio de grado tres que se obtiene pasa necesariamente por dichos cuatro puntos, lo que conduce en - nuestro caso a la aparición de un punto de inflexión de escaso significado físico y de gran influencia a la hora de obtener las derivadas respecto a la densidad que nos van a ser necesarias más adelante.

En la misma tabla 3.3 se encuentran los valores que se obtienen para la compresibilidad isoterma con los ajustes polinómicos de ambos grados, así como su representación en la fig.3.7. Como es natural, las mayores diferencias corresponden a los extremos, pero aún así, son inferiores al 3.5%.

Figura 3.6.- Mediante  $\circ$  se representan los valores de  $P_o/K$  obtenidos mediante la simulación para el sistema de referencia de parámetros  $d_{ss}=3.2295 \text{ \AA}$ ,  $d_{sc}=3.6089 \text{ \AA}$  y  $d_{cc}=3.4735 \text{ \AA}$ . La línea de puntos es el ajuste de éstos por un polinomio de grado dos, y la de trazo continuo el ajuste por un polinomio de grado tres.

Figura 3.7.- Valores de la compresibilidad isoterma, para el sistema de referencia de la figura anterior, deducidos del ajuste polinómico de grado dos ( $\square$ ) y de grado tres ( $\circ$ ).

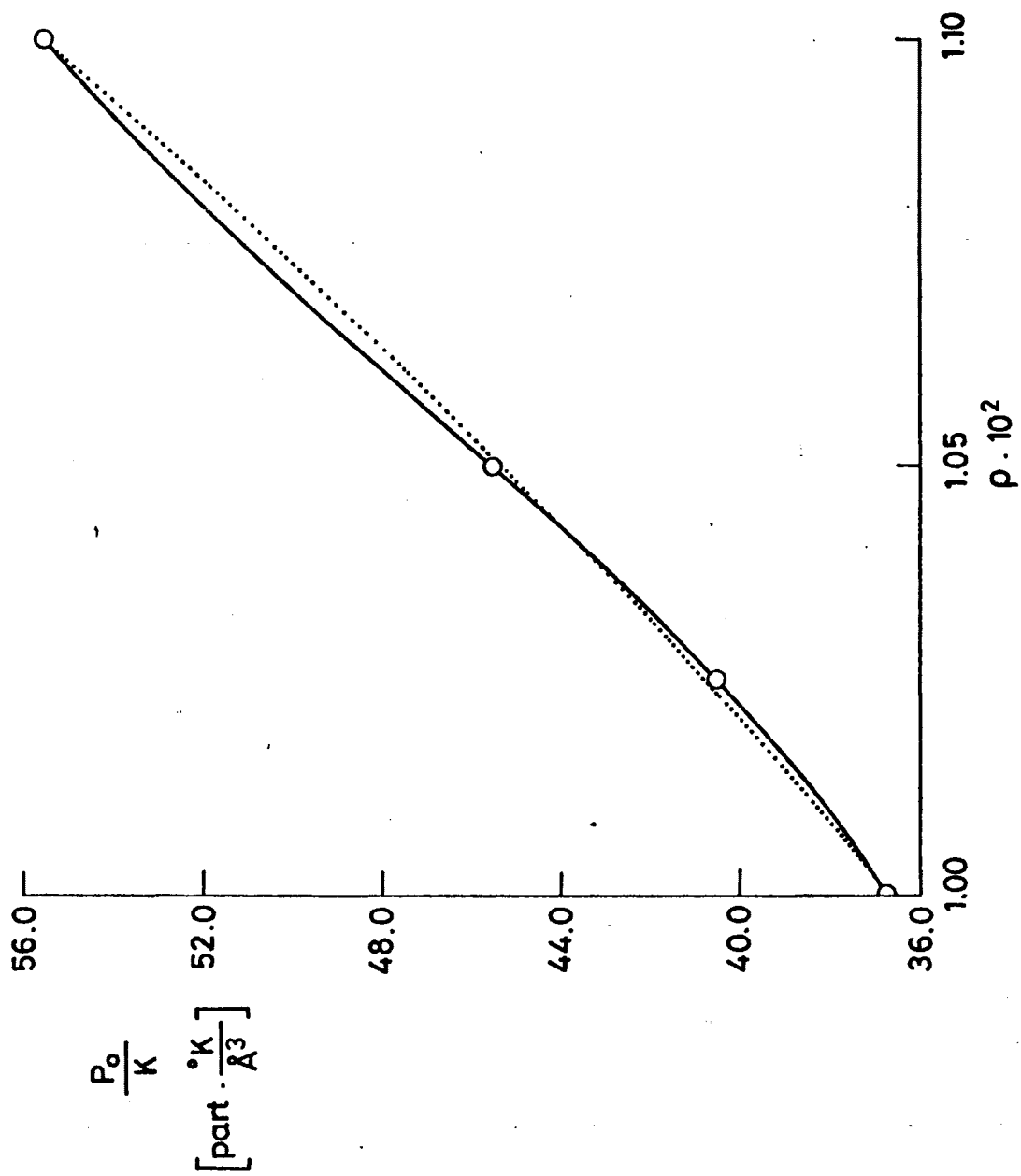


FIG. 3.6

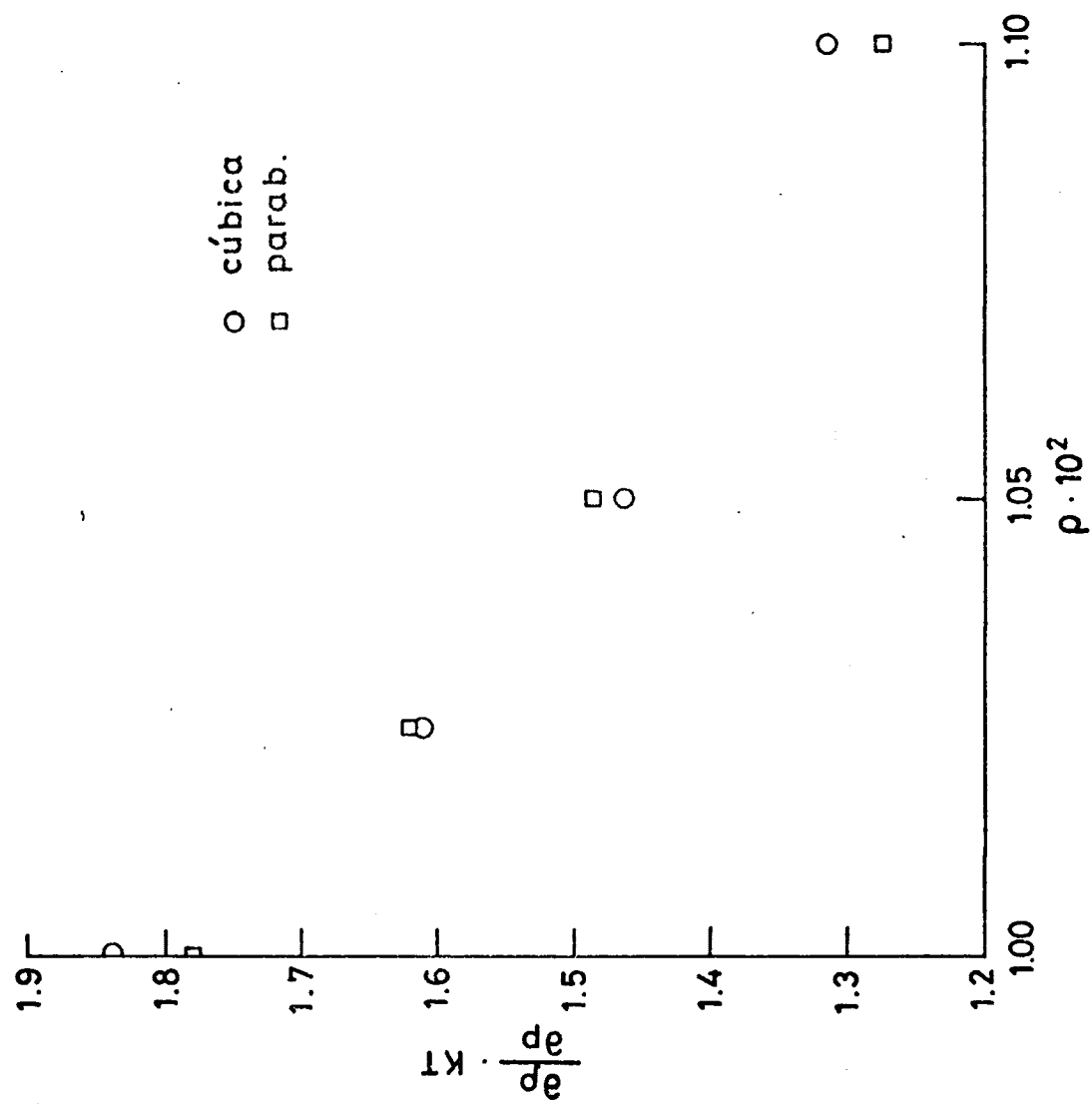


FIG. 3.7

Tabla 3.3.- Compresibilidad isotérmica:  $\frac{\partial \rho}{\partial P}$  KT.

Densidad	$P_0/\rho KT$	$P_0/K$	GRADO 2	GRADO 3
$1.000 \times 10^{-2}$	13.020	36.74	$1.78 \times 10^{-2}$	$1.84 \times 10^{-2}$
$1.025 \times 10^{-2}$	14.013	40.53	$1.62 \times 10^{-2}$	$1.61 \times 10^{-2}$
$1.050 \times 10^{-2}$	15.373	45.55	$1.49 \times 10^{-2}$	$1.46 \times 10^{-2}$
$1.100 \times 10^{-2}$	17.911	55.59	$1.28 \times 10^{-2}$	$1.32 \times 10^{-2}$

En el cálculo de las integrales  $L_{ij}$ , definidas como:

$$L_{ij} = 2\pi\rho\beta \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}(r)U_{ij}(r)r^2 dr$$

el límite superior se ha sustituido por un  $r_s$  tal que  $g_{ij}(r) \approx 1$  para todo  $r \geq r_s$ , ya que entonces

$$\int_{r_s}^{\infty} U_{ij}(r)r^2 dr$$

es independiente de la densidad y desaparece al obtener las derivadas respecto a ésta.

Según el tipo de función,  $r_s$  ha variado entre 10.5 y 13.5 Å.

La integración se ha efectuado numéricamente por el método de Simpson, con un número de puntos comprendido entre 85 y 111, dependiendo de  $r_s$ , y siempre con un intervalo entre puntos de 0.085 Å.

Para tener una idea del error numérico, hemos efectuado la integral:

$$\frac{1}{4\epsilon_{sc}} \int_{4.0}^{11.815} g_{sc}(r) U_{sc}(r) r^2 dr, \text{ haciendo } g_{sc}(r)=1,$$

con lo cual es analíticamente integrable. Los valores exacto y por Simpson son los siguientes:

<u>Nº de puntos</u>	<u>Valor exacto</u>	<u>Valor numérico</u>
93	-0.432784	-0.432776

Los valores obtenidos para las integrales  $L_{ij}$  se recogen en la tabla 3.4, donde  $L$  es, por tanto, la contribución de primer orden a la energía Hemlholtz,  $A/NKT$ .

Tabla 3.4.- Valores de las integrales  $L_{ij}$  y de  $L$ .

Densidad	$L_{ss}$	$L_{sc}$	$L_{cc}$	$L$
$1.000 \times 10^{-2}$	-11.75	-1.60	-0.38	-13.73
$1.025 \times 10^{-2}$	-12.12	-1.63	-0.39	-14.14
$1.050 \times 10^{-2}$	-12.45	-1.66	-0.40	-14.51
$1.100 \times 10^{-2}$	-13.13	-1.72	-0.42	-15.27

La derivada de  $L$  respecto a la densidad es la contribución de primer orden a la presión y como veremos su valor es decisivo en el balance total de la presión (incluido el segundo término de la perturbación), por lo que es muy importante tratar de evaluar el error que puede cometerse en dicha derivación, que necesariamente hay que efectuar numéricamente. Como dijimos antes, hemos llevado a cabo este proceso por el camino de ajustar un polinomio y por el de extrapolar los cocientes incrementales. Ambas cosas se han realizado tomando primero los datos correspondientes a las tres densidades:  $1 \times 10^{-2}$ ,  $1.05 \times 10^{-2}$  y  $1.1 \times 10^{-2}$ , y luego para las cuatro

incluyendo el punto a la densidad 1.025. La tabla 3.5 muestra los valores para la densidad  $1 \times 10^{-2}$ .

Tabla 3.5.- Valores de la derivada de la integral L respecto a  $\rho$ .

Nº de puntos utilizados	Ajuste polinomio grado dos	Extrapolación de cocientes incrementales
3	-15.904	-15.900
4	-16.107	-16.600

Como puede verse, todos los datos se diferencian entre sí menos de un 5%.

Los desarrollos de la forma  $f(\rho) = a\rho^2 + b\rho + c$ , que hemos efectuado para las magnitudes  $P_0$ , L y  $P_0/\rho KT$ , así como el que se deduce de éstos para  $\rho(\partial L/\partial \rho)$  se muestra en la tabla 3.6.

Tabla 3.6.- Valores de coeficientes del desarrollo en  $\rho$ .

	$P_0/K$	$P_0/\rho KT$	L	$\rho(\partial L/\partial \rho)$
c	192.425	29.966	9.95	0
b	-47003.	-7730.6	-3125.5	-3125.5
a	3142378	603251	75737	151473

Con lo cual el desarrollo para la presión a que conduce la teoría de perturbaciones de primer orden es:

$$\frac{P}{KT} = 754724\rho^2 - 10856\rho + 29.966 \quad (3.5)$$

Para  $\rho = 1 \times 10^{-2}$  part  $\text{\AA}^{-3}$ , la ecuación (3.5) toma el valor



-3.12, que comparado con el que obtuvimos en el capítulo segundo de -3.58, pudiera parecer muy discordante, pero si lo que comparamos es el valor del coeficiente de compresibilidad descontado el valor del sistema de referencia  $(P/\rho KT)_0$ , es decir

$$\left(\frac{P}{\rho KT}\right)_{MC} - \left(\frac{P}{\rho KT}\right)_0 = -16.6,$$

vemos que frente al valor dado por la perturbación  $P_1/\rho KT = -16.1$  arroja una diferencia de tan sólo el 3%, mientras que tras todos los cálculos numéricos efectuados en la obtención de  $P_1$  es casi seguro que el error con que puede venir afectado sea al menos de este orden, y esto sin tener en cuenta las imprecisiones que puedan acompañar a  $(P/\rho KT)_0$  y  $(P/\rho KT)_{MC}$ . Esto es una seria desventaja de la teoría de perturbaciones que aunque, como vemos en este caso, obtenga los términos de la perturbación con un error razonablemente pequeño, puesto que éstos son muy próximos en valor absoluto, pero de signo contrario, la incertidumbre resultante para el valor final de la presión es considerable.

A continuación vamos a describir el cálculo del segundo término en el desarrollo de perturbaciones para la presión. Como veremos, el cálculo numérico que es necesario efectuar es significativamente superior y sometido a mayores imprecisiones que en el caso del primer término, por cuanto como se ve en la ecuación (3.1), será necesario evaluar derivadas de segundo orden respecto a la densidad. Dicho segundo término valdrá:

$$\begin{aligned} \frac{P_2}{\rho KT} &= \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left\{ \sum_{ij} \pi_{ij} \left( \frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_0 \frac{\partial}{\partial \rho} \left| \rho \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^0(r) U_{ij}^2(r) r^2 dr \right| \right\} = \\ &= \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left\{ K \pi \rho T \left( \frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_0 \frac{\partial}{\partial \rho} \sum_{ij} \left| \frac{\rho}{K^2 T^2} \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^0(r) U_{ij}^2(r) r^2 dr \right| \right\} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Llamando

$$\Omega = \sum_{ij} \frac{\rho}{K^2 T^2} \int_{\sigma_{ij}}^{\infty} g_{ij}^o(r) U_{ij}^2(r) r^2 dr$$

y utilizando para  $(\partial \rho / \partial P)_0$  la expresión que se obtiene a partir - del desarrollo polinómico que hicimos anteriormente de  $P_0$ , llega- mos a:

$$\frac{P_2}{\rho K T} = \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left\{ \frac{\pi \rho K T}{7090 \rho - 53.02} \frac{\partial \Omega}{\partial \rho} \right\} \quad (3.7)$$

En la tabla 3.7 aparecen los valores que hemos obtenido para  $\Omega$  en función de la densidad.

Tabla 3.7.- Valores de la función  $\Omega$ .

$\rho \times 10^2 \text{ part. \AA}^3$	$\Omega \times 10^2$
1.000	34.012
1.025	35.309
1.050	36.463
1.100	38.812

Para obtener  $\partial \Omega / \partial \rho$ , hemos desarrollado, tal como hemos venido haciendo hasta ahora,  $\Omega$  polinómicamente hasta el grado dos, em- pleando la tabla 3.7 para determinar los coeficientes. El resulta- do encontrado es:

$$\partial \Omega / \partial \rho = 5782 \rho + 108.5, \text{ con lo cual se tiene que}$$

$$\frac{P_2}{K T} = \rho \left\{ \frac{(11564 \rho + 108.5) (7090 \rho - 53.02) - 7090 (5782 \rho^2 + 108.5 \rho)}{(7090 \rho - 53.02)^2} \right\} \quad (3.8)$$

donde en el segundo miembro de la igualdad hemos sustituido  $T$  por su valor  $282.16^\circ\text{K}$ .

La tabla 3.8 resume de una forma numérica los resultados obtenidos hasta ahora para el desarrollo de perturbaciones de la presión hasta su segundo término.

Tabla 3.8.- Valores de los sucesivos términos de perturbación para la presión.

$\rho \times 10^2 \text{ part. \AA}^{-3}$	$P_0/\rho KT$	$P_1/\rho KT$	$P_2/\rho KT$
1.000	12.985	-16.11	0.24
1.025	14.106	-16.12	0.21
1.050	15.303	-16.12	0.18
1.100	17.927	-16.05	0.13

En cuanto a los valores de  $P_2/\rho KT$ , cabe destacar su pequeña magnitud y su signo positivo. Respecto a lo primero hay que hacer notar que su valor es incluso inferior al error probable que acompaña al resto de los términos de la perturbación, por lo que en estas condiciones su inclusión en el desarrollo no resulta significativa y se puede prescindir de él. En relación a su signo, el hecho de que sea positivo indica que la convergencia de la perturbación no va a ser monótona, sino oscilante, y si volvemos a considerar la pequeña magnitud de éste, debemos concluir que dicha convergencia ha sido prácticamente alcanzada. Esta última consideración está sometida, desgraciadamente, a las ambigüedades inherentes al error numérico que puede afectar al mencionado segundo término, y que pudiera ser importante.

Los resultados obtenidos en este apartado pueden resumirse diciendo que el segundo término de la perturbación puede conside-

rarse despreciable, y que el desarrollo de ésta hasta el primer término conduce a resultados concordantes, dentro del error que cabe esperar acompañe a éste, con los que podemos considerar exactos y que obtuvimos en el capítulo II por el método de MC.

### 3.4.- Sistema de referencia con parámetros realistas

En este apartado se analiza el comportamiento de la teoría de perturbaciones cuando se toma un sistema de referencia que no anula el término de primer orden en  $\alpha$ . En el capítulo I se encontró que con los parámetros de potencial  $d_{ss}=d_{cc}=d_{sc}=3.4\text{\AA}$  para el modelo de esferas fusionadas, se lograba un buen ajuste a las funciones de distribución radial entre centros del sistema con potencial L-J (12:6) calculadas por DM<sup>35</sup>, y por lo tanto, éste es un caso en que se han cumplido razonablemente bien las aproximaciones implícitas en el desarrollo de la perturbación, aunque como ya se ha mencionado, en el cálculo de las integrales que es preciso efectuar, hay que introducir los valores de las funciones de distribución en  $d_{ij}$  y sus cercanías, que es justo donde aparecen las mayores discrepancias entre las funciones del modelo rígido y las del L-J.

Así en este caso vamos a tomar como sistema de referencia precisamente aquel en que los diámetros rígidos son iguales a  $3.4\text{\AA}$  y del cual efectuamos varias simulaciones a distintas densidades en el capítulo I, cuyos resultados emplearemos aquí.

Aparte de los cálculos que respecto a  $P_0$  efectuamos en el capítulo I, que se resumen en la ecuación (1.18), y de los que hemos realizado para el primer término de igual forma a como lo hicimos en el apartado anterior, que se muestran en la tabla 3.9, es necesario calcular el término de primer orden en  $\alpha$  como veremos más adelante.

Tabla 3.9.- Valores de las integrales L; caso de diámetros -  
rígidos iguales a 3.4 Å.

Densidad	L <sub>ss</sub>	L <sub>sc</sub>	L <sub>cc</sub>	L
.997 x 10 <sup>-2</sup>	-12.572	-1.569	-0.370	-14.51
1.05 x 10 <sup>-2</sup>	-13.471	-1.640	-0.389	-15.50
1.09 x 10 <sup>-2</sup>	-14.140	-1.688	-0.401	-16.23

Tras ajustar un polinomio de grado dos a L para poder deter-  
minar su derivada respecto a la densidad se obtiene el valor -  
-18.87 para el primer término de la perturbación P<sub>1</sub>/ρKT. Asimismo  
hemos hallado esta magnitud mediante el límite de los cocientes -  
incrementales llegando a un resultado de -18.81 en excelente -  
acuerdo con el anterior.

A la vista de la escasa significancia del segundo término de  
la perturbación que hemos obtenido en el apartado anterior, aquí  
vamos a prescindir de él y para completar el desarrollo solo nos  
resta calcular el término en α , que como hemos dicho anteriorment  
te viene dado por:

$$\frac{P_{\alpha}}{\rho KT} = \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \left\{ \sum_{ij} \alpha 2\pi \rho d_{ij}^2 g_{ij}^0(d_{ij}) |d_{ij}| \int_0^{\sigma_{ij}} (1 - e^{-\beta U_{ij}(z)}) dz \right\} \quad (3.9)$$

En la expresión anterior aparece la cantidad  $g_{ij}^0(d_{ij})$  que es  
el valor de la función de distribución radial entre centros a la  
distancia de contacto y que viene dada por la ecuación (1.2), co-  
mo vimos en el capítulo I. Si bien usualmente es una magnífica a-  
proximación suprimir en esta ecuación el límite a condición de e-  
legir un valor de Δr suficientemente pequeño, esto no es factible

para la distancia de contacto, pues la función de distribución, - en las cercanías de ésta, varía muy bruscamente para los modelos de esferas duras, y hay que evaluar necesariamente dicho límite. Para efectuar ésto hemos procedido de forma análoga a como hicimos en el primer capítulo para determinar lo que llamamos función de contacto para la presión; como allí, hemos elegido tres cortezas esféricas concéntricas y centradas en los centros de interacción, pero con la diferencia de que ahora éstas no son sucesivas y de igual espesor, sino con espesores crecientes e incluidas las de menor anchura en las de mayor. La diferencia estriba en que en tonces se trataba de la determinación del valor que tomaba la función en un punto a partir de la extrapolación de los valores de dicha función, y aquí es la evaluación de una función calculando directamente el límite mediante el cual se la define. El procedimiento en concreto ha consistido en ajustar por mínimos cuadrados una recta a los valores que mediante la simulación se han obtenido para  $\{n_{\alpha\beta}(d_{\alpha\beta} + \Delta r)\}/\Delta r$  con  $\Delta r = 0.0025, 0.0050$  y  $0.0075 \text{ \AA}$ . La tabla 3.10 recoge los resultados de estas extrapolaciones a las diferentes densidades.

Tabla 3.10.- Valores extrapolados de las funciones de distribución radial en el punto de contacto.

$\rho \times 10^2$	$4  2\pi\rho d_{ss}^2 g_{ss}^o(d_{ss}) $	$4  2\pi\rho d_{sc}^2 g_{sc}^o(d_{sc}) $	$4  2\pi\rho d_{cc}^2 g_{cc}^o(d_{cc}) $
0.997	5.418	2.651	0.220
1.050	6.347	3.061	0.313
1.090	7.017	3.743	0.345

La integral de la ecuación (3.9) es la misma evaluada en el apartado anterior para determinar los parámetros de potencial del sistema de referencia que allí usamos, por lo que sustituyendo - sus valores, y teniendo en cuenta que para nuestro sistema de referencia ahora  $d_{ss} = d_{sc} = d_{cc} = 3.4 \text{ \AA}$ , el término en  $\alpha$  se puede escribir como :

$$\frac{P_{\alpha}}{\rho KT} = -\rho \left\{ 0.17051 \frac{\partial G_{ss}}{\partial \rho} - 0.20887 \frac{\partial G_{sc}}{\partial \rho} - 0.07354 \frac{\partial G_{cc}}{\partial \rho} \right\}$$

donde hemos sustituido  $\alpha=1$  y  $G_{ij}=2\pi\rho d_{ij}^2 g_{ij}^0(d_{ij})$ .

Como ha sido habitual hasta aquí, hemos expresado las funciones  $G_{ij}$  mediante polinomios de grado dos, cuyas representaciones aparecen en las figuras 3.8, 3.9 y 3.10, para poder calcular sus derivadas respecto a la densidad. Estas las hemos calculado también como el límite de los cocientes incrementales  $\Delta G_{ij}/\Delta\rho$  y en la tabla 3.11 se comparan los valores de ambos métodos para la densidad  $0.997 \times 10^{-2} \text{ part.}\text{\AA}^{-3}$ . Como puede verse hay un acuerdo total.

Tabla 3.11.- Comparación de los valores de  $\partial G_{ij}/\partial\rho$  obtenidos por dos métodos distintos.

	$\rho \left( \frac{\partial G_{ss}}{\partial \rho} \right) .997 \times 10^{-2}$	$\rho \left( \frac{\partial G_{sc}}{\partial \rho} \right) .997 \times 10^{-2}$	$\rho \left( \frac{\partial G_{cc}}{\partial \rho} \right) .997 \times 10^{-2}$
Ajuste polinómico	17.92	2.43	2.30
Cocientes incrementales	17.90	2.40	2.30

Con los datos de esta tabla puede calcularse  $P_{\alpha}/\rho KT$  y como inmediatamente antes hemos obtenido  $P_1/\rho KT$ , basta tomar el resultado de  $P_0/\rho KT$ , hallado en el capítulo primero, para llegar al valor de  $P/\rho KT$ :

$$\frac{P}{\rho KT} = 12.854 - 2.38 - 18.87 = -8.4$$

Este valor extraordinariamente negativo se debe principalmente al fuerte incremento que experimenta la función  $g_{ss}$  en el punto de contacto al aumentar la densidad, como puede verse en la figura 1.25, y que repercute directamente en el valor de  $P_{\alpha}/\rho KT$ ,

Figura 3.8.- Mediante o se representan los valores -  
obtenidos para  $4 G_{ss} = 8\pi\rho d_{ss}^2 g_{ss}(d_{ss})$  me-  
diante la simulación por MC del modelo -  
con parámetros de potencial  $\sigma_{ss} = \sigma_{sc} = \sigma_{cc} =$   
 $= 3.4 \text{ \AA}$  para tres densidades. Con trazo -  
continuo aparece el ajuste polinómico de  
dichos puntos.

Figura 3.9.- Idem que la anterior pero para la interac-  
ción S-C.

Figura 3.10.- Idem para la interacción C-C.



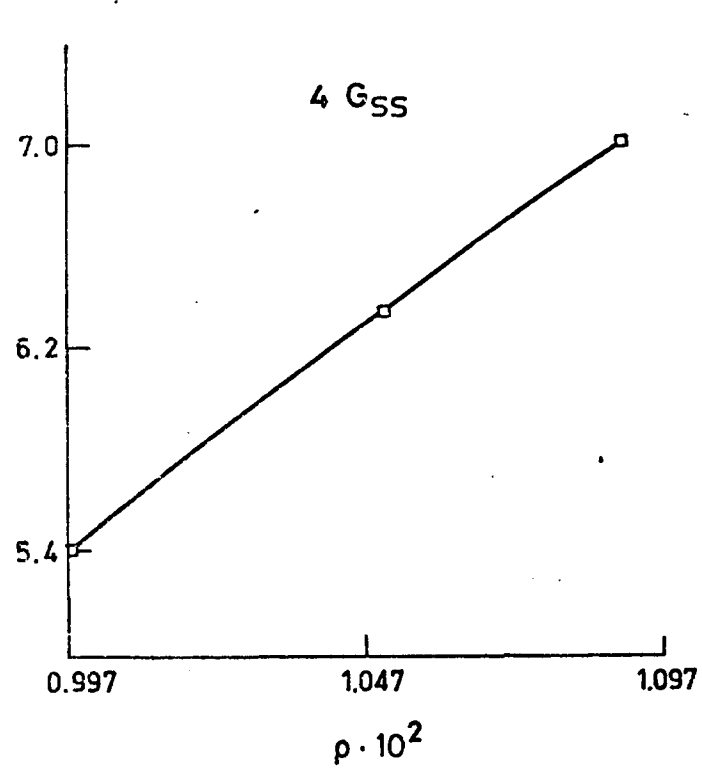


FIG. 3.8

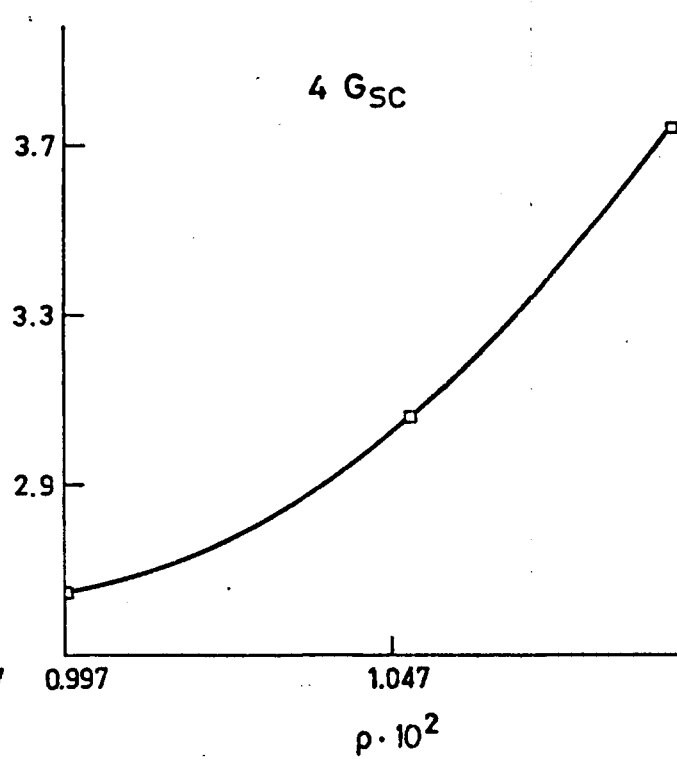


FIG. 3.9

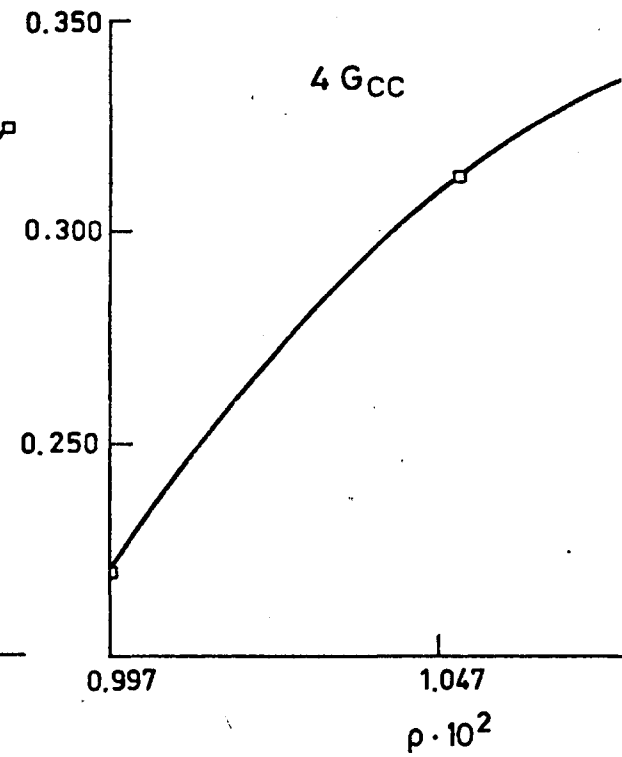


FIG. 3.10

así como en el de  $P_1/pKT$ , por el hecho de que el parámetro  $\sigma_{ss}$  - del potencial L-J es menor que el  $d_{ss}$  del sistema de referencia.

Como hemos repetido varias veces, es a la distancia de contacto donde las discrepancias entre las funciones del sistema de referencia y del sistema con potencial L-J son más acusadas, lo - que unido a la preponderancia casi exclusiva de las interacciones S-S y al mencionado brusco incremento de  $g_{ss}$  acarrea esta fuerte desviación en el valor de la presión. A la vista de estas consideraciones podemos deducir que para obtener valores coherentes de - la presión, mediante este desarrollo de perturbaciones para el -  $CS_2$ , en primer lugar debemos elegir un parámetro  $d_{ss}$  para el sistema de referencia cuanto menos inferior al correspondiente  $\sigma_{ss}$  - del sistema con potencial L-J. En el apartado siguiente se analizan dos casos donde se cumple esta condición.

### 3.5.- Aplicación del desarrollo de perturbaciones a la elección - de parámetros de potencial.

Actualmente uno de los principales problemas, y puede que el más importante, que se plantea en el estudio del estado líquido, es encontrar un potencial efectivo para las moléculas del fluido que sea eficiente en la descripción de las propiedades de éste. Cuando se elige como potencial el L-J (12:6) esto se traduce en - hallar los parámetros  $\epsilon$  y  $\sigma$  adecuados. Para ésto último el camino más seguro y preciso es realizar el cálculo por simulación de una serie de magnitudes como pueden ser la energía interna y la presión para un conjunto de parámetros y en varias condiciones de - temperatura y densidad hasta encontrar una pareja que reproduzca satisfactoriamente los datos experimentales. Desgraciadamente este proceso es costosísimo de efectuar y en la práctica sólo se ha realizado parcialmente para algunos casos muy concretos, como es

el del  $N_2$ <sup>24,25,26</sup>, reuniendo trabajos de varios autores.

Con respecto a este problema, nosotros queremos considerar - un aspecto importante de las ecuaciones (3.1) y (3.3), que consiste en que una vez determinados los datos necesarios del sistema - de referencia, la energía Hemholtz y la presión para el sistema con interacciones de potencial L-J (12:6) aparecen como una función precisamente de los parámetros  $\epsilon$  y  $\sigma$  de este potencial, y - por tanto dichas ecuaciones nos permiten de una forma sencilla y sin grandes problemas de cálculo hacer una elección de parámetros que conduzcan a los valores de A y P deseados.

Sin embargo, no hay que olvidar que los resultados que se obtengan vendrán afectados de los errores inherentes a la propia - perturbación y a limitaciones que restringen el campo de existencia de los valores que podemos usar para los parámetros, tales como la encontrada en el apartado anterior, que, como vimos, obliga para el caso del  $CS_2$  a operar con valores de  $\sigma_{ss}$  superiores al parámetro  $d_{ss}$  del sistema de referencia. Aún dentro de estas restricciones nos parece que esta aplicación de la teoría de perturbaciones puede resultar muy interesante y dentro de este apartado hemos hecho uso de ella para calcular el valor de la presión que se obtiene empleando dos parejas de parámetros de potencial, para las cuales Tildesley<sup>47</sup> ha efectuado así mismo este cálculo mediante simulación por el método de DM, lo que nos permitirá contrastar - los resultados.

De los dos sistemas de referencia que hemos empleado hasta - aquí, es para el que hemos desarrollado en el apartado denominado "elección clásica", para el que mejor se cumple la restricción -  $\sigma_{ss} > d_{ss}$  con los valores dados a  $\sigma_{ss}$  en (47) y que aparecen en la tabla 3.12, además de ser el sistema para el que disponemos de mayor cantidad de datos, por lo que será el que aquí utilizaremos.

En primer lugar a los cálculos que ya hemos efectuado hay -

que añadir los necesarios para determinar el término en  $\alpha$  de la perturbación; éstos los hemos realizado de igual forma que en el apartado anterior, y se recogen en la tabla 3.13 y en las figuras 3.11, 3.12 y 3.13.

Tabla 3.12.-Parámetros para el potencial de L-J.

	Modelo A	Modelo B
$\sigma_{cc}$	3.35 Å	3.58 Å
$\sigma_{cs}$	3.44 Å	3.47 Å
$\sigma_{ss}$	3.52 Å	3.37 Å
$\epsilon_{cc}/K$	51.20K	79.13K
$\epsilon_{cs}/K$	96.80K	123.21K
$\epsilon_{ss}/K$	183.00K	190.70K

Tabla 3.13.-Valores extrapolados de las funciones de distribución radial en el punto de contacto.

$\rho \times 10^2$	$4  2\pi\rho d_{ss}^2 g_{ss}^o(d_{ss}) $	$4  2\pi\rho d_{sc}^2 g_{sc}^o(d_{sc}) $	$4  2\pi\rho d_{cc}^2 g_{cc}^o(d_{cc}) $
1.000	3.304	4.748	0.302
1.025	3.650	5.093	0.294
1.050	4.141	5.476	0.274
1.100	4.777	6.460	0.460

La expresión final a la que se llega para el término en  $\alpha$  es:

$$P_{\alpha} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^2 B_{ij} a_i \rho^{(j-1)} \quad (3.10)$$

Siendo

$$B = \begin{pmatrix} 6961,1 & -519972 \\ -8645,9 & 986100 \\ -7838,7 & 760680 \end{pmatrix}$$

Figuras 3.11, 3.12 y 3.13.- Estas representaciones son análogas a las figuras 3.8, 3.9 y 3.10, pero con los resultados obtenidos para el modelo con  $\sigma_{ss}=3.2295 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_{sc}=3.6089 \text{ \AA}$  y  $\sigma_{cc}=3.4735 \text{ \AA}$ .

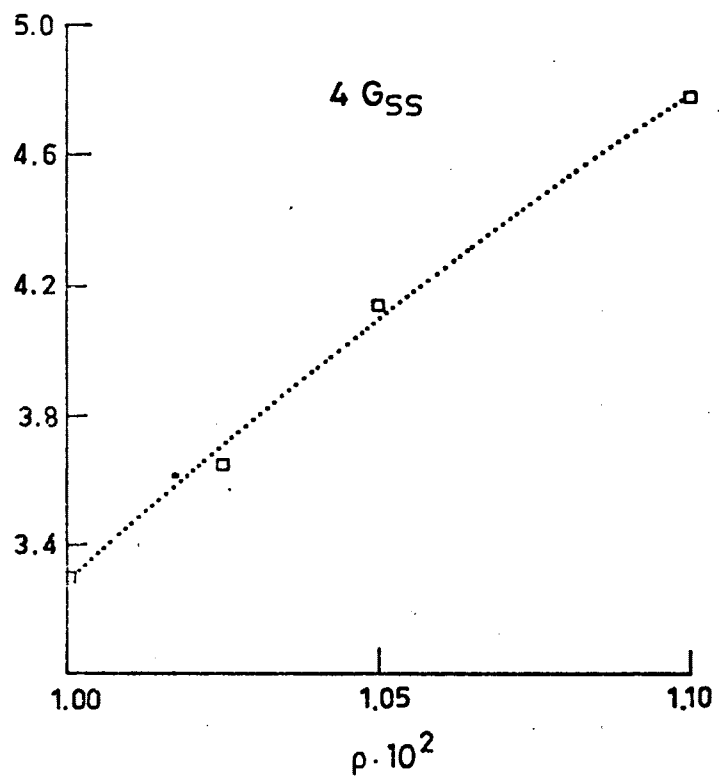


FIG. 3.11

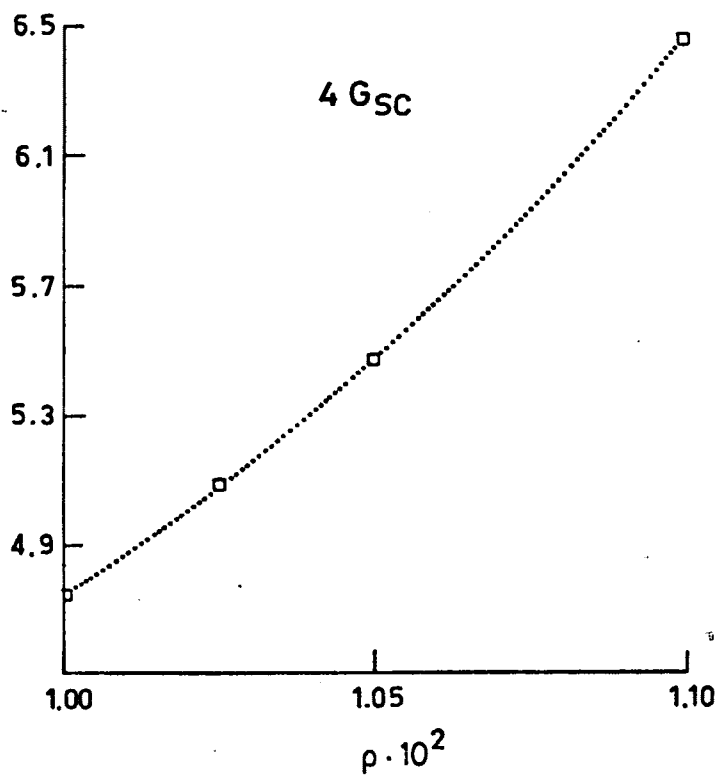


FIG. 3.12

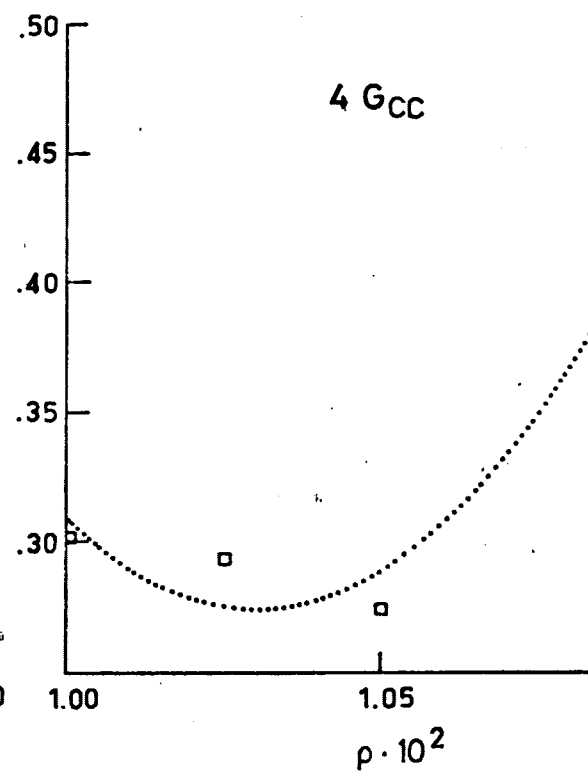


FIG. 3.13

$$y \quad a = (d_{ss}^* - d_{ss}, d_{sc}^* - d_{sc}, d_{cc}^* - d_{cc})$$

$$\text{con } d_{ij}^* = \int_0^{\sigma_{ij}} \frac{-U_{ij}/KT}{(1-e^{-U_{ij}/KT})} d\sigma$$

mientras que los  $d_{ij}$  son los parámetros del sistema de referencia.

La matriz B es independiente del modelo, pero no así el vector -a-, que depende de los valores de  $\epsilon_{ij}$  y  $\sigma_{ij}$  y se recoge en la tabla 3.14 junto al valor de  $P_\alpha/\rho KT$ .

Tabla 3.14.- Valores de a y de  $P_\alpha/\rho KT$ .

Modelo	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$P_\alpha/\rho KT$
A	-0.16213	0.35511	0.37928	-0.58
B	-0.02092	0.30163	0.1099	-3.04

Para calcular el primer término del desarrollo se ha procedido como siempre y en la tabla 3.15 se recogen las contribuciones de primer orden a la energía Hemholtz para ambos modelos.

Tabla 3.15.- Contribución de primer orden a la energía Hemholtz en ambos modelos.

$\rho \times 10^2$	$\frac{A_1^A}{\rho KT} V$	$\frac{A_1^B}{\rho KT} V.$
1.00	-10.512	-11.661
1.05	-11.117	-12.380
1.10	-11.713	-13.067

Finalmente por derivación de los ajustes polinómicos para los datos de la tabla anterior se obtienen los valores de  $P_1/\rho KT$  y con esto los de  $P/\rho KT$  que predice el desarrollo de perturbacio-

nes para un sistema de interacciones L-J (12:6) con los parámetros de potencial de los llamados modelos A y B. Dichos resultados, junto a los obtenidos por Tildesley<sup>47</sup> por DM, así como los correspondientes al modelo de Steinhauser<sup>35</sup>, que llamaremos C y que se calcularon por MC en el capítulo II y por perturbaciones en un apartado anterior de este capítulo se recogen en la tabla 3.16.

Tabla 3.16.- Ecuación de estado.

	$\left( \frac{P}{\rho K T} \right)_{\rho=1.0 \times 10^{-2}}$		
	Modelo A	Modelo B	Modelo C
DM	-0.06	-3.9	-4.3
MC	-	-	-3.6
Perturbaciones	0.25	-4.7	-3.1

La discrepancia en el dato para el modelo C entre DM y MC ya fue analizada en el capítulo II y al no disponer de los datos MC para los otros modelos, las conclusiones se verán naturalmente restringidas; no obstante, podemos decir que el desarrollo de perturbaciones predice de una forma razonable el valor del coeficiente de compresibilidad para los tres modelos y que si bien no conduce a valores exactos de éste, sus resultados son aplicables en la determinación o cuanto menos en la selección de los parámetros  $\epsilon$  y  $\sigma$  del potencial de L-J.



## RESUMEN Y CONCLUSIONES

Esta memoria recoge el estudio que hemos realizado para el di sulfuro de carbono en estado líquido, describiendo esta molécula mediante diferentes modelos de potencial y empleando el método de MC para la obtención tanto de las propiedades termodinámicas del fluido como de las estructurales. El estudio se ha completado con la aplicación a ésta molécula de la teoría de perturbaciones B-H.

Queremos hacer notar que en dicho estudio se ha prestado tanta importancia, como al propio  $\text{CS}_2$ , a la crítica de los modelos - teóricos del estado líquido que, con anterioridad, han sido aplicados a dicho fluido, y que hemos ido revisando, en base a nuestros resultados de simulación.

En cuanto a los resultados obtenidos, hay que mencionar en - primer lugar el diseño, elaboración y optimización de los programas de cálculo pertinentes, por su doble papel de ser, por un lado condición necesaria y la tarea que mayor cantidad de trabajo ha necesitado por su natural complejidad y por las limitaciones en los recursos técnicos de computación disponibles; y de otra parte por el conjunto de oportunidades de trabajo que con ellos se abre y a las que son de inmediata aplicabilidad; en este punto hay que tener en cuenta que se trata del primer trabajo que sobre simulación de moléculas actuando con potenciales pluricéntricos se lleva a ca bo en nuestro país<sup>49</sup>.

De los datos que hemos obtenido y detallado a lo largo de esta memoria podemos resumir los siguientes:

- Funciones de distribución radial de centros y función de - distribución molecular para el  $\text{CS}_2$  con el modelo de potencial duro y densidad prefijada, para varios juegos de parámetros y a varias densidades, reseñando que en el caso de la

función de distribución molecular es la primera vez que se obtiene de una forma exacta para el  $\text{CS}_2$ .

- Factor de estructura para el modelo de esferas fusionadas aplicado al  $\text{CS}_2$  y ecuación de estado del mismo líquido.
- Función de distribución molecular para el  $\text{CS}_2$  descrito con un potencial tricéntrico de interacciones L-J (12:6), así como presión y energía interna para este modelo.
- Obtención de la ecuación de perturbaciones de primer orden de la teoría B-H como una serie de aproximaciones a las expresiones, en términos de las funciones de distribución, de las variables termodinámicas.
- Aplicación, por primera vez a una molécula tricéntrica, de la teoría de perturbaciones B-H generalizada, para la obtención de la ecuación de estado del  $\text{CS}_2$  con diferentes sistemas de referencia, y obtención, asimismo por primera vez, - del término en  $\alpha$  y del segundo término de dicha teoría de - perturbaciones para un fluido de moléculas pluricéntricas.

Siendo las conclusiones más importantes que se derivan de estos resultados las que exponemos a continuación:

- Los resultados que se obtienen, en cuanto a las funciones de distribución radial, por la teoría RISM, para unos parámetros dados del potencial, sólo coinciden con los "exactos", provenientes de la simulación por MC, de una forma muy cualitativa, desaconsejándose su uso en el cálculo de otras - magnitudes, como el factor de estructura, para la que obtiene resultados muy poco satisfactorios.
- La estructura fina de las funciones de distribución radial del  $\text{CS}_2$  es consecuencia de la diferente localización de los

máximos para cada una de las configuraciones angulares de un par de moléculas, y no de la preponderancia de una de estas configuraciones en la estructura del  $\text{CS}_2$  líquido como se ha pretendido con anterioridad.

- El factor de estructura no se revela como una magnitud experimental selectiva de un modelo de potencial, por cuanto modelos sensiblemente diferentes obtienen un ajuste análogo de dicha magnitud.
- Puesto que los criterios clásicos en la evaluación de un "core" rígido a partir de un potencial continuo, resultan ineficaces en el caso de moléculas con centros de marcada diferencia en cuanto a la magnitud de sus interacciones, debido a lo inadecuado de considerar los centros independientes, nosotros hemos realizado una aproximación mucho más realista centro-molécula, y no centro-centro, de resultados mucho más satisfactorios.
- La estructura que se obtiene del fluido  $\text{CS}_2$  mediante un potencial tricéntrico de interacciones L-J (12:6) puede obtenerse a su vez con un alto grado de concordancia a partir de un modelo de esferas duras fusionadas para las partículas y una densidad para el sistema, como prueban las funciones de distribución molecular que para ambos casos hemos obtenido.
- La función de distribución molecular para el  $\text{CS}_2$  muestra que no existe ninguna configuración de pares de moléculas que predomine netamente en el fluido, si bien existe una cierta preferencia por orientarse las moléculas con sus ejes sensiblemente paralelos, pero formando éstos un ángulo de  $3\pi/8$  con la dirección que une sus centros de masas.

- A pesar de las importantes limitaciones formales a la teoría de perturbaciones B-H, los resultados que con ésta se obtienen para el  $\text{CS}_2$  son razonablemente buenos.
- La elección no clásica del sistema de referencia en la teoría de perturbaciones B-H provee de un método útil para la elección de los parámetros  $\epsilon$  y  $\sigma$  de un potencial efectivo - tipo L-J (12:6) para interacciones pluricéntricas.

## BIBLIOGRAFIA

- 1.- J.P.Hansen y I.R.McDonald, "*Theory of Simple Liquids*", (N.Y., Academic, 1976).
- 2.- R.O.Watts y I.J.McGee, "*Liquid State Chemical Physics*", (N.Y., Wiley, 1976).
- 3.- T.Boublik y otros, "*Statistical Thermodynamics of Simple Liquids and their Mixtures*", (Amsterdam, Elsevier, 1980).
- 4.- K.E.Gubbins y C.G.Gray, "*Statistical Mechanics of Polyatomic Fluids*", (Oxford, OUP, 1981).
- 5.- W.Marshall y S.W.Lovesey, "*Theory of Thermal Neutron Scattering*", (London, OUP, 1971).
- 6.- J.F.Karnicky y C.J.Pins, *Adv.Chem.Phys.*, 34, 157 (1976).
- 7.- L.Blum y A.H.Narten, *Adv.Chem.Phys.*, 34, 203 (1976).
- 8.- C.A.Croxtan, "*Liquid State Physics*", (London, CUP, 1974);  
K.E.Gubbins, C.G.Gray, P.A.Egelstaff y M.S.Ananth, *Mol. Phys.*, 25, 1353 (1973);  
M.S.Ananth, K.E.Gubbins y C.G.Gray, *Mol.Phys.*, 28, 1005, (1974).
- 9.- B.J.Berne y P.Pechukas, *J.Chem.Phys.*, 56, 4213, (1972);  
J.Kushick y B.J.Berne, *J.Chem.Phys.*, 64, 1362 (1976).
- 10.- A.Rahman, F.H.Stillinger y J.Lemberg, *J.Chem.Phys.*, 63, 5223 (1975);  
I.R.McDonald y M.L.Klein, *J.Chem.Phys.*, 64, 4790 (1976).
- 11.- A.Koide y T.Kihara, *Chem.Phys.*, 5, 34 (1974);  
T.Kihara, "*Intermolecular Forces*", (Chichester, Wiley, 1978)

- 12.- J.R.Sweet y W.A.Steele,*J.Chem.Phys.*,47, 3029,(1967).
- 13.- M.Lombardero, J.L.F.Abascal y S.Lago,*Mol.Phys.*,42, 999 (1981).
- 14.- D.J.Tildesley,*Mol.Phys.*,41, 341 (1980).
- 15.- H.C.Anderson y D.Chandler,*J.Chem.Phys.*,57, 1918 (1972);  
D.Chandler y H.C.Anderson,*J.Chem.Phys.*,57, 1930 (1972).
- 16.- L.J.Lowden y D.Chandler,*J.Chem.Phys.*,59, 6587 (1973);  
Idem., Ibid.,61, 5228 (1974);  
Idem., Ibid.,62, 4246 (1975).
- 17.- C.S.Hsu y D.Chandler,*Mol.Phys.*,36, 215 (1978).
- 18.- L.J.Lowden,"*RISM, RISMGR, RISMSK, Programa QCPE,nº306*",  
(Bloomington, Indiana Univ.).
- 19.- D.Chandler,*Ann.Rev.Phys.Chem.*,29, 441 (1978).
- 20.- J.L.F.Abascal, "*Tesis Doctoral*",(Madrid, 1981).
- 21.- N.Metrópolis, A.W.Rosenbluth, M.N.Rosenbluth, A.N.Teller  
y E.Teller,*J.Chem.Phys.*,21, 1087 (1953);  
B.J.Alder y T.E.Wainwright,*J.Chem.Phys.*,27, 1208 (1957);  
A.Rahman,*Phys.Rev.*,136, 405 (1964);  
L.Verlet,*Phys.Rev.*,159, 98 (1967).
- 22.- B.J.Alder,*An.Rev.Phys.Chem.*,24, 325 (1973);  
W.W.Wood,"*Fundamental Problems in Statistical Mechanics*",  
Vol.3,Ed.E.D.G.Cohen (Amsterdam,North Holland, 1975);  
W.W.Wood y J.J.Erpenbeck,*Ann.Rev.Phys.Chem.*,27, 319 (1976).



- 23.- J.J.Erpenbeck y W.W.Wood,"*Modern Theoretical Chemistry*", Vol.6,"*Statistical Mechanics of Time Dependent Processes*", Capítulo 1, Ed.B.J.Berne (N.Y.,Plenum,1977);  
J.Kushick y B.J.Berne, Ibid,Capítulo 2;  
J.P.Valleau y S.G.Whittington,"*Modern Theoretical Chemistry*",Vol.5,"*Equilibrium Statistical Mechanics of Fluids*", Capítulo 4,Ed.B.J.Berne (N.Y.,Plenum, 1976);  
J.P.Valleau y G.M.Torrie, Ibid, Capítulo 5;  
J.Santamaria,"*Termodinámica Estadística*",Capítulo 15, Ed. M.Díaz Peña,(Alhambra, Madrid, 1979).
- 24.- P.S.Y.Cheung y J.G.Powles,*Mol.Phys.*,30, 921 (1975).
- 25.- J.Barojas, Levesque y B.Quentrec,*Phys.Rev.A.*,7, 1092 (1973).
- 26.- K.Singer, A.J.Taylor y J.V.L.Singer,*Mol.Phys.*,33, 1757, (1977);  
K.Singer, J.V.L.Singer y A.J.Taylor,*Mol.Phys.*,37, 1239, (1979);  
M.Evans,*Mol.Phys.*,34, 963 (1977);  
S.Romano y K.Singer,*Mol.Phys.*,37, 1765 (1979);  
E.Detyna, J.V.L.Singer, K.Singer y A.J.Taylor,*Mol.Phys.*,41, 31 (1980).
- 27.- W.B.Street, D.J.Tildesley y G.Saville,*Mol.Phys.*,35, 639 (1978);  
S.Murad, D.J.Evans, K.E.Gubbins, W.B.Street y D.J.Tildesley,*Mol.Phys.*,37, 725 (1979);  
J.G.Powles, W.A.B.Evans, E.McGrath, K.E.Gubbins y S.Murad,*Mol.Phys.*,38, 893 (1979);  
W.A.Steele y W.B.Street,*Mol.Phys.*,39, 279 (1980);  
Idem, *ibid.*,39, 299 (1980);  
S.Murad, K.E.Gubbins y J.G.Powles,*Mol.Phys.*,40, 253(1980).  
O.Steinhauser y M.Newman,*Mol.Phys.*,40, 115 (1980).

- 28.- J.C.Owicki y H.A.Scheraga,*J.Am.Chem.Soc.*, 99, 7403 (1977);  
Idem, *ibid.*, 99, 7413 (1977);  
J.C.Owicki y N.A.Scheraga,*J.Phys.Chem.*, 82, 1257 (1978);  
S.Swaminathan, S.W.Harrison y D.L.Beveridge,*J.Am.Chem.Soc.*,  
100, 5705 (1978).
- 29.- W.B.Street y D.J.Tildesley,*Proc.Roy.Soc.A.*, 348, 485 (1976);  
Idem, *ibid.*, 355, 239 (1977);  
Idem, *J.Chem.Phys.*, 68, 1275 (1978).
- 30.- S.I.Sandler y A.H.Narten,*Mol.Phys.*, 32, 1543 (1976).
- 31.- K.Suzuki y P.A.Egelstaff,*Can.J.Chem.*, 52, 241 (1974).
- 32.- J.C.Dore y I.P.Gibson,*Faraday Disc.*, 66, 79 (1979).
- 33.- B.M.Ladanyi, T.Keyes, D.J.Tildesley y W.Street,*Mol.Phys.*,  
39, 645 (1980).
- 34.- W.B.Street y D.J.Tildesley,*Faraday Disc.*, 66, 28 (1979).
- 35.- O.Steinhauser y M.Newman,*Mol.Phys.*, 37, 1921 (1979).
- 36.- I.Nezbeda,*Mol.Phys.*, 35, 1287 (1977).
- 37.- I.Aviran, D.J.Tildesley y W.B.Street,*Mol.Phys.*, 34, 881  
(1977).
- 38.- D.J.Tildesley y W.B.Street,*Mol.Phys.*, 41, 85 (1980).
- 39.- A.H.Narten,*Mol.Phys.*, 35, 1077 (1978).
- 40.- Anotemos de pasada que en la fórmula (3.4) de la referen-  
cia 33 hemos detectado una errata: El signo + debe ser un  
signo -; de ésta forma la expresión coincide con nuestra

fórmula (1.13).

- 41.- L.N.G.Filon, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh*, A49, 38 (1928).
- 42.- J.M.Hammersley y D.C.Handscomb, "*Monte Carlo Methods*", (Wiley, N.Y., 1964).
- 43.- C.S.Hsu, D.Chandler y L.J.Lowden, *Chem. Phys.*, 14, 213 (1976).
- 44.- R.Agrawal, S.I.Chandler y A.H.Narten, *Mol. Phys.*, 35, 1087 (1978).
- 45.- I.P.Gibson y J.C.Dore, *Mol. Phys.*, 42, 83 (1981).
- 46.- P.J.Rossky, J.D.Doll y H.L.Friedman, *J. Chem. Phys.*, 69, 4628 (1978).
- 47.- D.J.Tildesley y P.A.Madden, *Mol. Phys.*, 42, 1137 (1981).
- 48.- J.A.Barker y D.Henderson, *J. Chem. Phys.*, 47, 2856 (1967);  
Ibid., 47, 4714 (1967).
- 49.- A.Bañón, R.M.Benito y J.Santamaría, *Comunicación 9.20 a la XVIII Reunión Bienal*, Burgos, 1980.

## APENDICES

## Apéndice A .-Método de cálculo MC para sistemas lineales con potencial rígido.

En la figura A.1, mostramos un organigrama a grandes rasgos del programa empleado en los cálculos para potenciales rígidos, - Como ya se ha dicho, además de este se ha empleado otro para obtener la cadena de termalización, pero en realidad no es más que - una simplificación de éste.

Entre las técnicas de programación que hemos empleado queremos detallar las siguientes:

1.- El empleo de las tablas de vecinos en el caso de potenciales rígidos es extraordinariamente eficiente, ya que el número de vecinos que hay que considerar respecto a una dada se limita a su primera esfera de coordinación, por lo que no se necesitan - grandes volúmenes de memoria interna para almacenar dichas tablas, a la vez que el análisis de los posibles solapamientos se hará - luego entre un número muy reducido de pares de partículas, lo que se traduce en un importante ahorro de tiempo.

2.- El efectuar los promedios cada M configuraciones aceptadas sobre todas las partículas y no a una partícula en cada configuración, aparte de las consideraciones formales que ya hemos hecho, supone la ventaja de que las distancias entre los centros - que constituyen las partículas  $i$  y  $j$  se realiza una sola vez, - mientras que, promediando los movimientos uno a uno se haría por duplicado.

3.- En la especificación de los centros que conforman a una partícula se han empleado simultáneamente coordenadas polares y - cartesianas; este empleo de coordenadas redundantes permite, con un pequeño gasto adicional de memoria, optimizar el tiempo de cál

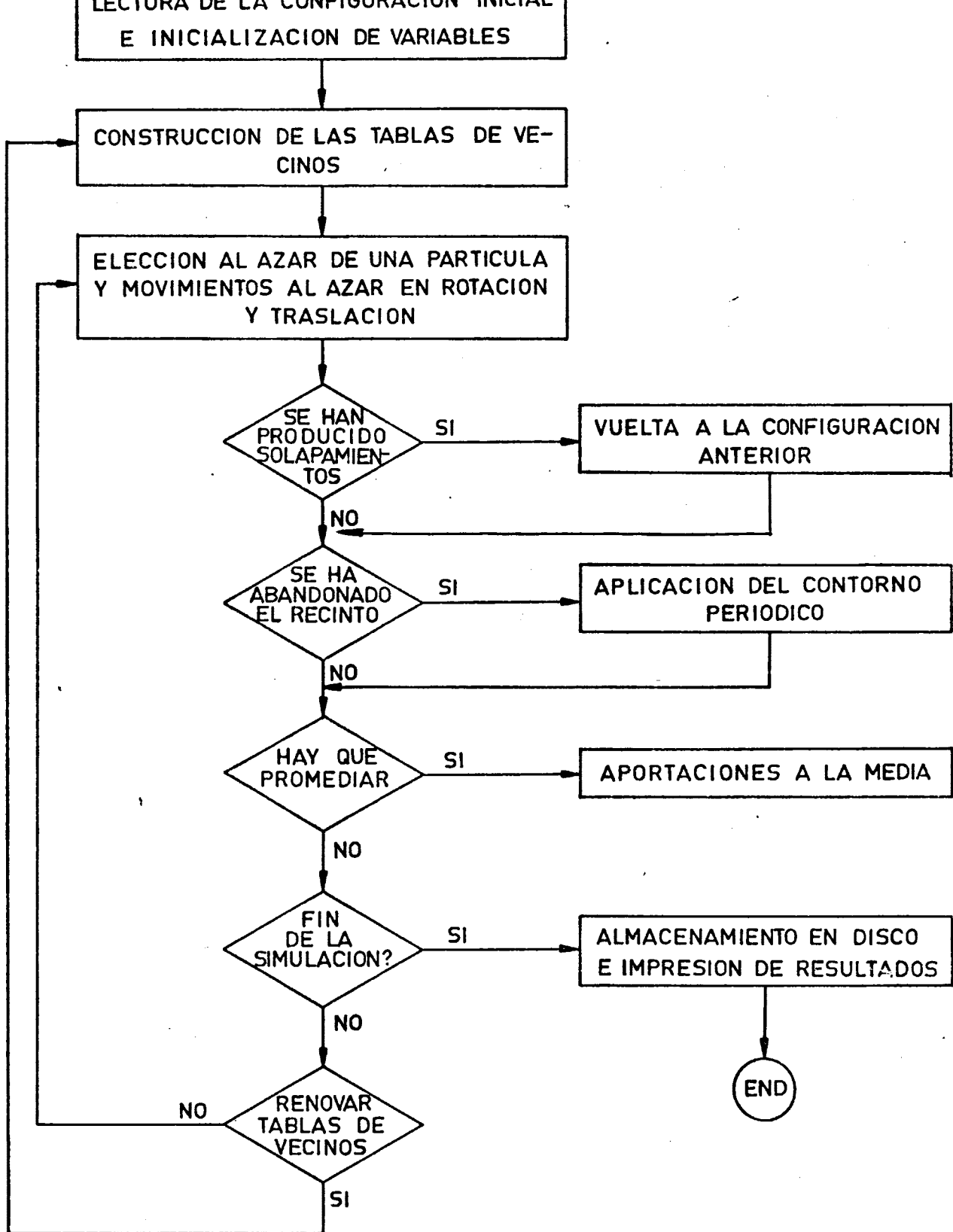


FIG. A1 .

Organigrama del programa para la simulación de potenciales rígidos  
(APENDICE A)

culo, ya que se pueden utilizar los valores cartesianos en el cálculo de las distancias entre centros, donde la opción polar requeriría el uso de funciones trigonométricas, y reservando la especificación en polares para las rotaciones en las que la utilización de coordenadas cartesianas exige funciones trigonométricas inversas.

## Apéndice B .-Método de simulación MC para sistemas lineales con potencial continuo.

En este apéndice daremos una descripción de las principales características del programa de cálculo que hemos elaborado para efectuar las simulaciones con potencial L-J.

El organigrama aparece en la figura B-1, y la característica esencial es el uso de las tres matrices U, P y G, cuyos elementos vienen definidos por:

$U_{ij} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} U_{\alpha\beta}(r)$  es la energía interna debida a la interacción de las partículas i y j.

$P_{ij} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \frac{\partial U_{\alpha\beta}}{\partial r_{\alpha\beta}} \frac{r_{\alpha\beta} R_{ij}}{|r_{\alpha\beta}|}$  es la presión debida al par (i,j).

$G_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{cuando } R_{ij} > r_c \\ s*100+r & \text{cuando } R_{ij} < r_c \end{cases}$

$r_c$  es el radio de corte y r,s son los subíndices de la matriz  $B_{rs}$  que se detalló en el capítulo primero.  $G_{ij}$  contiene la información de a qué celda del histograma de la función de distribución molecular contribuye el par (i,j). Ya que  $r < 99$ , se pueden recuperar fácilmente los valores de r y s según:

$s = \text{Parte entera } ( G_{ij}/100 )$   
 $r = G_{ij} - s*100$

Como  $s < 276$ , para almacenar G basta con palabras de dos octetos que pueden albergar números menores o iguales que 32768. El resultado es que la memoria interna necesaria para G se reduce a



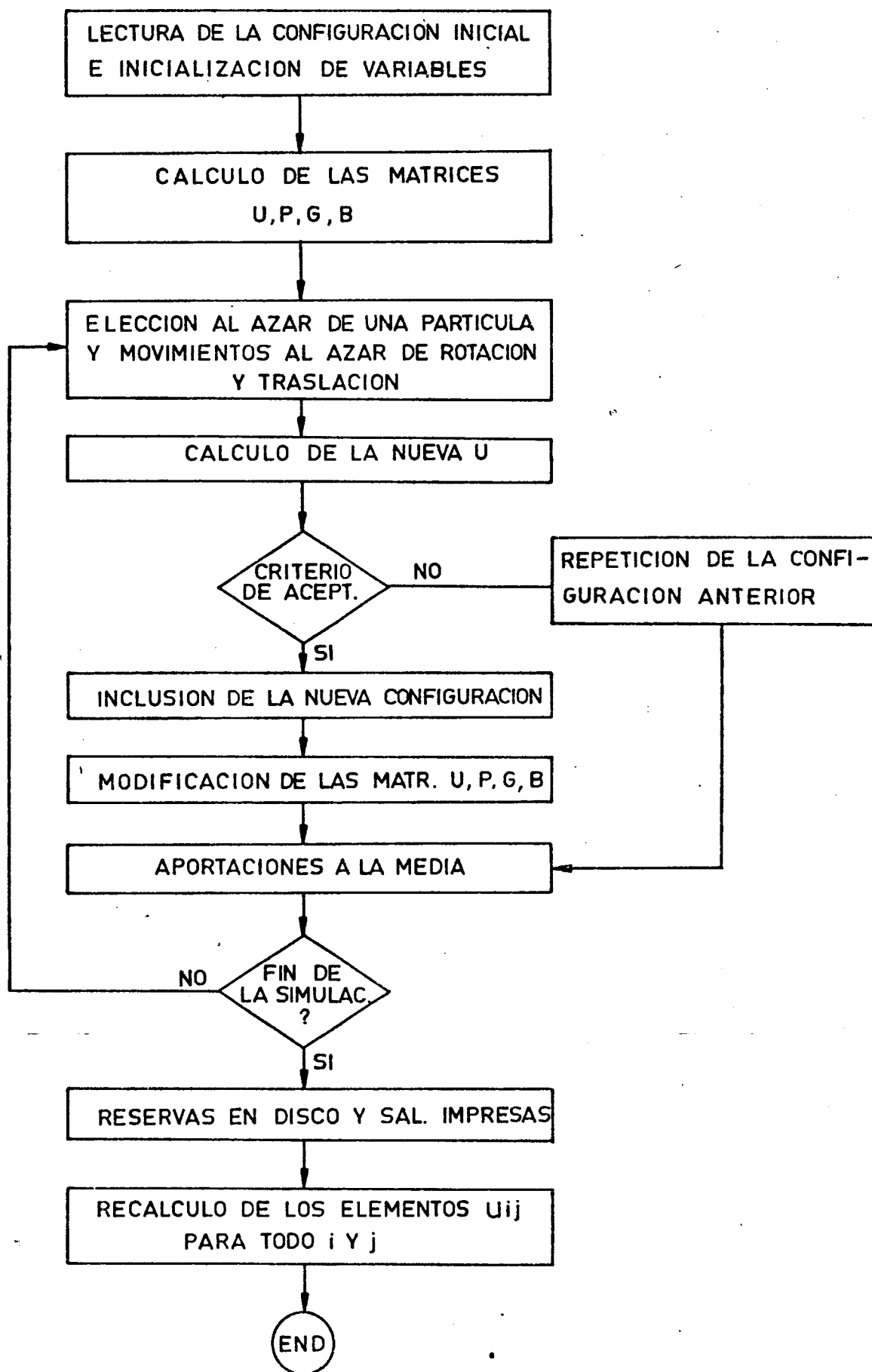


FIG. B1  
Organigrama (APENDICE B)

la mitad con este artificio. Las tres matrices que acabamos de describir son simétricas con la diagonal principal nula, lo que permite reducirlas a un vector. La relación biunívoca entre la pareja de índices de la matriz (i,j) y del vector (l) viene dada por:

$$l = \frac{i(i-1)}{2} + j$$

Este nuevo artificio reduce a menos de la mitad la memoria necesaria para almacenar dichas matrices. No obstante estos grandes ahorros de memoria, para un sistema de 216 partículas, el volumen necesario supera las 100K (1K = 1024 palabras), que supone una considerable cantidad de memoria, incluso para los ordenadores más modernos.

A continuación vamos a mostrar el uso de estas matrices y sus ventajas:

Evidentemente la energía interna y la presión de una configuración n del sistema de partículas se reduce a la suma de los elementos de las matrices  $U^n$  y  $P^n$  respectivamente. Esto no comportaría ninguna ventaja si a cada configuración hubiese que calcular dichas matrices de las fórmulas dadas anteriormente para sus elementos. Sin embargo, como de una configuración a otra se pasa por el movimiento, al azar en rotación y traslación, de una sola partícula (j) la energía interna y presión de esta configuración "n+1" se puede obtener como:

$$U_{j \rightarrow j'}^{(n+1)} = U^n - \sum_i U_{ji} + \sum_i U_{j'i} = U^n + \sum_i (U_{j'i} - U_{ji})$$

$$P_{j \rightarrow j'}^{(n+1)} = P^n - \sum_i P_{ij} + \sum_i P_{j'i} = P^n + \sum_i (P_{j'i} - P_{ji})$$

Estos cálculos sólo envuelven un sumatorio en  $i=1, \dots, N$  y no el doble sumatorio que contiene la fórmula clásica de la energía interna, o presión, en la aproximación por aditiva

$$U = 1/2 \sum_i \sum_j U_{ij}(r) \quad i,j=1,\dots,N$$

Esto es equivalente a reducir los cálculos en la proporción  $N^2/N=N$  y también por lo tanto el tiempo de éstos. Para 216 partículas es obvio que esto es fundamental, pues se reduce el tiempo a un 0.4% del necesario sin el artificio, lo que no sólo justifica el empleo de la gran cantidad de memoria mencionada antes, sino que pone de manifiesto la imposibilidad práctica de la simulación sin él.

El artificio resulta evidente si se sustituye el concepto dinámico de "desplazamiento" al azar de una partícula por el estático de "sustitución". Por lo que para obtener las matrices de una nueva configuración basta con sustituir la columna de la partícula "sustituida".

Todo lo dicho en cuanto a la evolución de las matrices U y P es aplicable a la matriz G, pero en cuanto a la determinación de la propiedad correspondiente, es decir, de la función de distribución molecular, no se hace de una forma directa como con la presión y la energía interna de configuración, ya que G no representa realmente contribuciones de pares, sino elementos de histograma. El procedimiento para obtener la función de distribución molecular es el siguiente:

A partir de  $G_{ij}$  se deducen los índices  $(s,r)_i$  correspondientes a la partícula sustituida (j), y se calculan los  $(s',r')_i$  resultantes para la (j') sustituyente con  $i=1,\dots,j-1,j+1,\dots,N$ ; - con esto se procede a eliminar las contribuciones de pares debidas a j según:

$$\{B(r,s) = B(r,s) - 1\}_i$$

y se incluyen las nuevas contribuciones provenientes de j', por medio de :

$$\{ B(r',s') = B(r',s') + 1 \}_i$$

Proceso que, como los anteriores, es función del número de -  
partículas N y no de su cuadrado.

Apéndice C.- Función de distribución molecular  $g(r, \theta_1, \theta_2, \Psi)$  del  $\text{CS}_2$  con potencial Lennard-Jones (12:6).

A continuación se dan los valores (en forma de salida directa de ordenador) de la función de distribución molecular del  $\text{CS}_2$  con potencial de Lennard-Jones (12:6), empleando los parámetros  $\epsilon_{ij}$  y  $\sigma_{ij}$  de Steinhauser y Newman<sup>35</sup>. En realidad lo que se significa es la fracción de pares de moléculas que para cada configuración angular  $(\theta_1, \theta_2, \Psi)$  aparecen en función de la distancia  $r$ . Los intervalos angulares de las variables  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  y  $\Psi$  son de  $\pi/16$ , resultando ocho valores angulares para  $\theta_1$ , ocho para  $\theta_2$  y dieciseis para  $\Psi$ ; - del radio  $r$  se dan cincuenta valores. El histograma completo contiene 13800 elementos (Ver Capítulo I, pag.15).

TETA 2 = 5.625 GRAJOS SEXAGESIMALES

TETA 1 = 5.625 GRAJOS SEXAGESIMALES

\* FI

R

\*

5.63

16.87

28.13

2.89	.00000000	.00000000	.00000000
3.06	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000
3.65	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00000000	.00000000	.00000000
5.20	.00000000	.00000000	.00000000
5.39	.00000000	.00000000	.00000000
5.58	.00000000	.00000000	.00000000
5.77	.00000000	.00000000	.00000000
5.97	.00000000	.00000000	.00000000
6.16	.00007173	.00004323	.00000000
6.35	.000069212	.00005273	.00000000
6.54	.00006663	.000059262	.00000000
6.74	.000119190	.000061715	.00000000
6.93	.000147735	.000066941	.00000000
7.12	.000169542	.000041263	.00000000
7.31	.000069323	.000054361	.00000000
7.51	.000069638	.000031515	.00000000
7.70	.000042108	.000019467	.00000000
7.89	.000033934	.000025166	.00000000
8.08	.000042758	.000012374	.00000000
8.28	.000046770	.000026542	.00000000
8.47	.000026661	.000029395	.00000000
8.66	.000027895	.000029781	.00000000
8.85	.000045154	.000024052	.00000000
9.05	.000049932	.000041722	.00000000
9.24	.000067725	.000046568	.00000000
9.43	.000092348	.000049367	.00000000
9.62	.000098561	.000043517	.00000000

9.82	00120027	00055162	00000000
10.01	00149028	00057191	00000000
10.20	00146171	00059237	00000000
10.39	00147767	00069311	00000000
10.59	00164566	00076441	00000000
10.76	00157866	00084783	00000000
10.97	00144033	00102366	00000000
11.16	00144366	00082441	00000000
11.36	00166353	00076237	00000000
11.55	00194322	00091177	00000000
11.74	00162588	00096474	00000000
11.93	00146542	00078320	00000000
12.13	00167733	00065379	00000000
12.32	00070339	00036284	00000000

ETA 1 = 16.875 GRADOS SEXAGESIMALES

* * FI			
R *			
2.89	00000000	16.87	28.13
3.08	00000000	00000000	00000000
3.27	00000000	00000000	00000000
3.46	00000000	00000000	00000000
3.66	00000000	00000000	00000000
3.85	00000000	00000000	00000000
4.04	00000000	00000000	00000000
4.23	00000000	00000000	00000000
4.43	00000000	00000000	00000000
4.62	00000000	00000000	00000000
4.81	00000000	00000000	00000000
5.00	00000000	00000000	00000000
5.20	00000000	00000000	00000000
5.39	00000000	00000000	00000000
5.58	00000000	00000000	00000000
5.77	00000000	00000000	00000000
5.97	00000000	00000000	00000000
6.16	00000000	00000000	00000000
6.35	00000000	00000000	00000000
6.54	00000000	00000000	00000000
6.74	00000000	00000000	00000000
6.93	00000000	00000000	00000000
7.12	00000000	00000000	00000000
7.31	00000000	00000000	00000000
7.51	00000000	00000000	00000000
7.70	00000000	00000000	00000000
7.89	00000000	00000000	00000000
8.08	00000000	00000000	00000000
8.28	00000000	00000000	00000000
8.47	00000000	00000000	00000000
8.66	00000000	00000000	00000000
8.85	00000000	00000000	00000000
9.05	00000000	00000000	00000000
9.24	00000000	00000000	00000000
9.43	00000000	00000000	00000000
9.62	00000000	00000000	00000000
9.82	00000000	00000000	00000000
10.01	00000000	00000000	00000000
10.20	00000000	00000000	00000000
10.39	00000000	00000000	00000000
10.59	00000000	00000000	00000000
10.78	00000000	00000000	00000000

10.97 .00180853 .00528461 .00278991  
 11.16 .00190868 .00539930 .00216467  
 11.36 .00165449 .00645512 .00249899  
 11.55 .00200705 .00596374 .00245794  
 11.74 .00207263 .00616522 .00264303  
 11.93 .00239199 .00599704 .00256772  
 12.13 .00195446 .00645102 .00261284  
 12.32 .00102832 .00337700 .00121317

TETA 1 = 28.125 GRADOS SEXAGESIMALES

\* \* FI

	28.13	39.37	50.62
2.49	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000
4.61	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00000000	.00000000	.00000000
5.20	.00000000	.00000000	.00000000
5.39	.00000000	.00000000	.00000000
5.58	.00000000	.00000000	.00000000
5.77	.00000000	.00000000	.00000000
5.97	.00000000	.00000000	.00000000
6.16	.00000000	.00000000	.00000000
6.35	.00000000	.00000000	.00000000
6.54	.00000000	.00000000	.00000000
6.74	.00000000	.00000000	.00000000
6.93	.00000000	.00000000	.00000000
7.12	.00000000	.00000000	.00000000
7.31	.00000000	.00000000	.00000000
7.51	.00000000	.00000000	.00000000
7.70	.00000000	.00000000	.00000000
7.89	.00000000	.00000000	.00000000
8.08	.00000000	.00000000	.00000000
8.28	.00000000	.00000000	.00000000
8.47	.00000000	.00000000	.00000000
8.66	.00000000	.00000000	.00000000
8.85	.00000000	.00000000	.00000000
9.05	.00000000	.00000000	.00000000
9.24	.00000000	.00000000	.00000000
9.43	.00000000	.00000000	.00000000
9.62	.00000000	.00000000	.00000000
9.82	.00000000	.00000000	.00000000
10.01	.00000000	.00000000	.00000000
10.20	.00000000	.00000000	.00000000
10.39	.00000000	.00000000	.00000000
10.59	.00000000	.00000000	.00000000
10.78	.00000000	.00000000	.00000000
10.97	.00000000	.00000000	.00000000
11.16	.00000000	.00000000	.00000000
11.36	.00000000	.00000000	.00000000
11.55	.00000000	.00000000	.00000000
11.74	.00000000	.00000000	.00000000
11.93	.00000000	.00000000	.00000000



12.13	.00287806	.00824273	.00307364
12.32	.00177143	.00431273	.00166106

TETA 1 = 39.375 GRAJOS SEXAGESIMALES

* FI			
R *	39.37	50.62	61.87
2.89	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00000000	.00000000	.00000000
5.20	.00000000	.00000000	.00000000
5.39	.00000000	.00000000	.00000000
5.58	.00000000	.00000000	.00000000
5.77	.00000000	.00000000	.00000000
5.97	.00000000	.00000000	.00000000
6.16	.00000000	.00000000	.00000000
6.35	.00000000	.00000000	.00000000
6.54	.00000000	.00000000	.00000000
6.74	.00000000	.00000000	.00000000
6.93	.00000000	.00000000	.00000000
7.12	.00000000	.00000000	.00000000
7.31	.00000000	.00000000	.00000000
7.51	.00000000	.00000000	.00000000
7.70	.00000000	.00000000	.00000000
7.89	.00000000	.00000000	.00000000
8.08	.00000000	.00000000	.00000000
8.28	.00000000	.00000000	.00000000
8.47	.00000000	.00000000	.00000000
8.66	.00000000	.00000000	.00000000
8.85	.00000000	.00000000	.00000000
9.05	.00000000	.00000000	.00000000
9.24	.00000000	.00000000	.00000000
9.43	.00000000	.00000000	.00000000
9.62	.00000000	.00000000	.00000000
9.82	.00000000	.00000000	.00000000
10.01	.00000000	.00000000	.00000000
10.20	.00000000	.00000000	.00000000
10.39	.00000000	.00000000	.00000000
10.59	.00000000	.00000000	.00000000
10.78	.00000000	.00000000	.00000000
10.97	.00000000	.00000000	.00000000
11.16	.00000000	.00000000	.00000000
11.36	.00000000	.00000000	.00000000
11.55	.00000000	.00000000	.00000000
11.74	.00000000	.00000000	.00000000
11.93	.00000000	.00000000	.00000000
12.13	.00000000	.00000000	.00000000
12.32	.00000000	.00000000	.00000000

TETA 1 = 50.625 GRAJOS SEXAGESIMALES

\* FI

R \*

	50.62	51.87	73.12
2.89	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00000000	.00000000	.00000000
5.20	.00000000	.00000000	.00000000
5.39	.00000000	.00000000	.00000000
5.58	.00000000	.00000000	.00000000
5.77	.00000000	.00000000	.00000000
5.97	.00000000	.00000000	.00000000
6.16	.00000000	.00000000	.00000000
6.35	.00000000	.00000000	.00000000
6.54	.00000000	.00000000	.00000000
6.74	.00000000	.00000000	.00000000
6.93	.00000000	.00000000	.00000000
7.12	.00000000	.00000000	.00000000
7.31	.00000000	.00000000	.00000000
7.51	.00000000	.00000000	.00000000
7.70	.00000000	.00000000	.00000000
7.89	.00000000	.00000000	.00000000
8.08	.00000000	.00000000	.00000000
8.28	.00000000	.00000000	.00000000
8.47	.00000000	.00000000	.00000000
8.66	.00000000	.00000000	.00000000
8.85	.00000000	.00000000	.00000000
9.05	.00000000	.00000000	.00000000
9.24	.00000000	.00000000	.00000000
9.43	.00000000	.00000000	.00000000
9.62	.00000000	.00000000	.00000000
9.82	.00000000	.00000000	.00000000
10.01	.00000000	.00000000	.00000000
10.20	.00000000	.00000000	.00000000
10.39	.00000000	.00000000	.00000000
10.59	.00000000	.00000000	.00000000
10.78	.00000000	.00000000	.00000000
10.97	.00000000	.00000000	.00000000
11.16	.00000000	.00000000	.00000000
11.36	.00000000	.00000000	.00000000
11.55	.00000000	.00000000	.00000000
11.74	.00000000	.00000000	.00000000
11.93	.00000000	.00000000	.00000000
12.13	.00000000	.00000000	.00000000
12.32	.00000000	.00000000	.00000000

TETA 1 = 61.875 GRADOS SEXAGESIMALES

\* FI

R \*

	61.87	73.12	84.38
2.89	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000

3.46	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00000000	.00000000	.00000000
5.20	.00000000	.00000000	.00000000
5.39	.00000000	.00000000	.00000000
5.58	.00000000	.00000000	.00000000
5.77	.00000000	.00000000	.00000000
5.97	.00000000	.00000000	.00000000
6.16	.00000000	.00000000	.00000000
6.35	.00000000	.00000000	.00000000
6.54	.00000000	.00000000	.00000000
6.74	.00000000	.00000000	.00000000
6.93	.00000000	.00000000	.00000000
7.12	.00000000	.00000000	.00000000
7.31	.00000000	.00000000	.00000000
7.51	.00000000	.00000000	.00000000
7.70	.00000000	.00000000	.00000000
7.89	.00000000	.00000000	.00000000
8.08	.00000000	.00000000	.00000000
8.28	.00000000	.00000000	.00000000
8.47	.00000000	.00000000	.00000000
8.66	.00000000	.00000000	.00000000
8.85	.00000000	.00000000	.00000000
9.05	.00000000	.00000000	.00000000
9.24	.00000000	.00000000	.00000000
9.43	.00000000	.00000000	.00000000
9.62	.00000000	.00000000	.00000000
9.82	.00000000	.00000000	.00000000
10.01	.00000000	.00000000	.00000000
10.20	.00000000	.00000000	.00000000
10.39	.00000000	.00000000	.00000000
10.59	.00000000	.00000000	.00000000
10.78	.00000000	.00000000	.00000000
10.97	.00000000	.00000000	.00000000
11.16	.00000000	.00000000	.00000000
11.36	.00000000	.00000000	.00000000
11.55	.00000000	.00000000	.00000000
11.74	.00000000	.00000000	.00000000
11.93	.00000000	.00000000	.00000000
12.13	.00000000	.00000000	.00000000
12.32	.00000000	.00000000	.00000000

TETA 1 = 73.125 GRADOS SEXAGESIMALES

\* FI  
-R \*

	73.12	94.33	95.62
2.89	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000

4.62	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00010000	.00010000	.00010000
5.00	.00020000	.00020000	.00020000
5.20	.00030000	.00030000	.00030000
5.39	.00040000	.00040000	.00040000
5.58	.00050000	.00050000	.00050000
5.77	.00060000	.00060000	.00060000
5.97	.00070000	.00070000	.00070000
6.16	.00080000	.00080000	.00080000
6.35	.00090000	.00090000	.00090000
6.54	.00100000	.00100000	.00100000
6.74	.00110000	.00110000	.00110000
6.93	.00120000	.00120000	.00120000
7.12	.00130000	.00130000	.00130000
7.31	.00140000	.00140000	.00140000
7.51	.00150000	.00150000	.00150000
7.70	.00160000	.00160000	.00160000
7.89	.00170000	.00170000	.00170000
8.08	.00180000	.00180000	.00180000
8.28	.00190000	.00190000	.00190000
8.47	.00200000	.00200000	.00200000
8.66	.00210000	.00210000	.00210000
8.85	.00220000	.00220000	.00220000
9.05	.00230000	.00230000	.00230000
9.24	.00240000	.00240000	.00240000
9.43	.00250000	.00250000	.00250000
9.62	.00260000	.00260000	.00260000
9.82	.00270000	.00270000	.00270000
10.01	.00280000	.00280000	.00280000
10.20	.00290000	.00290000	.00290000
10.39	.00300000	.00300000	.00300000
10.59	.00310000	.00310000	.00310000
10.78	.00320000	.00320000	.00320000
10.97	.00330000	.00330000	.00330000
11.16	.00340000	.00340000	.00340000
11.36	.00350000	.00350000	.00350000
11.55	.00360000	.00360000	.00360000
11.74	.00370000	.00370000	.00370000
11.93	.00380000	.00380000	.00380000
12.13	.00390000	.00390000	.00390000
12.32	.00400000	.00400000	.00400000

TETA 1 = 84.375 GRAJOS SEXAGESIMALES

\* FI

-R \*

	84.38	95.62	106.87
2.89	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00001154	.00001438	.00002204
4.81	.00001762	.00001369	.00004828
5.00	.00200446	.00614250	.00222263
5.20	.00382280	.01044167	.00372956
5.39	.00371484	.00394836	.00372178
5.58	.00238374	.00664953	.00251084

5.77	.00193158	.00475714	.00190279
5.97	.00177526	.00357193	.00164800
6.16	.00121724	.00273779	.00111304
6.35	.00112653	.00271779	.00108854
6.54	.00084758	.00221535	.00077444
6.74	.00055484	.00166559	.00059129
6.93	.00069502	.00184193	.00072617
7.12	.00062249	.00204591	.00076438
7.31	.00068484	.00198523	.00077468
7.51	.00073823	.00213763	.00079758
7.70	.00092802	.00273195	.00094055
7.89	.00157576	.00420375	.00170872
8.08	.00208229	.00526945	.00224473
8.28	.00207958	.00577707	.00242196
8.47	.00261651	.00709493	.00246075
8.66	.00291250	.00747755	.00318029
8.85	.00310716	.00873059	.00353117
9.05	.00364182	.00956373	.00377580
9.24	.00368839	.00948375	.00364191
9.43	.00314917	.00862153	.00392197
9.62	.00340281	.00924175	.00355324
9.82	.00296587	.00832263	.00317392
10.01	.00326379	.00862293	.00293377
10.20	.00382711	.00906387	.00326695
10.39	.00344176	.00921407	.00335472
10.59	.00360469	.00883423	.00299281
10.78	.00336822	.00953527	.00350515
10.97	.00345861	.00854309	.00312796
11.16	.00349225	.00958177	.00366543
11.36	.00349830	.01010592	.00344635
11.55	.00435496	.01203769	.00373533
11.74	.00496257	.01131131	.00425909
11.93	.00486801	.01157785	.00471801
12.13	.00506581	.01362749	.00501146
12.32	.00283503	.00667543	.00260220

TETA 2 = 16.875 GRADOS SEXAGESIMALES

TETA 1 = 16.875 GRADOS SEXAGESIMALES

* FI					
R *	5.63	16.87	28.13	39.37	50.62
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.20	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.39	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.58	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.77	.00005429	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.97	.00005499	.00002772	.00011491	.00002219	.00000000
6.16	.000243927	.00194532	.00137690	.00063524	.00000000
6.35	.000464545	.00476522	.00422175	.00150582	.00000000

6.54	.00475684	.00519307	.00455782	.00210223	.00000000
6.74	.00440216	.00409724	.00437869	.00164495	.00000000
6.93	.00351919	.00312765	.00313506	.00113088	.00000000
7.12	.00251294	.00223395	.00267071	.00078706	.00000000
7.31	.00183921	.00198378	.00270130	.00066653	.00000000
7.51	.00173705	.00192495	.00224084	.00077632	.00000000
7.70	.00150926	.00176884	.00159616	.00051217	.00000000
7.89	.00148140	.00141171	.00159908	.00045759	.00000000
8.08	.00149622	.00169231	.00116277	.00076895	.00000000
8.28	.00141316	.00094165	.00147100	.00053586	.00000000
8.47	.00133502	.00127273	.00140443	.00067833	.00000000
8.66	.00179745	.00178995	.00181452	.00067385	.00000000
8.85	.00189081	.00143505	.00184449	.00092089	.00000000
9.05	.00168322	.00160137	.00193236	.00084564	.00000000
9.24	.00216134	.00255661	.00240004	.00104138	.00000000
9.43	.00263696	.00262942	.00306435	.00106459	.00000000
9.62	.00338706	.00235272	.00341166	.00097817	.00000000
9.82	.00328904	.00254131	.00329034	.00176051	.00000000
10.01	.00337389	.00314944	.00328954	.00140869	.00000000
10.20	.00387891	.00331330	.00421866	.00154211	.00000000
10.39	.00421706	.00404064	.00443937	.00180180	.00000000
10.59	.00450323	.00374024	.00457779	.00196853	.00000000
10.78	.00429128	.00326773	.00479773	.00196236	.00000000
10.97	.00426017	.00339281	.00434974	.00171606	.00000000
11.16	.00344765	.00372993	.00466992	.00172060	.00000000
11.36	.00443952	.00420307	.00427488	.00198689	.00000000
11.55	.00444556	.00412252	.00489254	.00192983	.00000000
11.74	.00465369	.00396147	.00445915	.00189896	.00000000
11.93	.00485563	.00469137	.00474242	.00206180	.00000000
12.13	.00469656	.00392147	.00464529	.00186137	.00000000
12.32	.00266662	.00205930	.00249883	.00084959	.00000000

TETA 1 = 28.125 GRAJOS SEXAGESIMALES

* FI					
R *	16.87	28.13	39.37	50.62	61.87
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.20	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.39	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.58	.00000000	.00012142	.00000000	.00000039	.00000000
5.77	.00037669	.00104144	.00046802	.00015281	.00001531
5.97	.00162397	.00337685	.00337685	.00164020	.00054648
6.16	.00418508	.01123183	.00755286	.00760245	.00270490
6.35	.00465977	.01276784	.00977969	.01274145	.00568346
6.54	.00360700	.01092097	.00935599	.01220222	.00584652
6.74	.00310074	.00917595	.00732860	.01002157	.00415928
6.93	.00193149	.00709570	.00584917	.00720854	.00300766
7.12	.00152335	.00500291	.00426570	.00640532	.00196924
7.31	.00163529	.00423223	.00341493	.00430289	.00170356
7.51	.00124017	.00401224	.00272559	.00431841	.00134820

7.70	00122926	00370357	00301028	00355629	00146625
7.89	00323187	00350354	00355289	00223146	00155604
8.08	00339455	00323145	00323145	00323145	00139400
8.28	00126104	00432141	00333112	00321151	00136029
8.47	00142955	00448462	00294034	00359496	00152255
8.66	00174610	00476522	00349027	00411345	00168616
8.85	00162223	00537413	00403866	00572186	00213295
9.05	00228448	00559374	00497545	00567578	00266969
9.24	00191816	00725115	00519908	00645154	00242748
9.43	00273439	00762103	00610398	00679194	00284858
9.62	00321335	00856521	00703064	00820227	00354682
9.82	00293136	00857747	00685030	00955981	00404135
10.01	00312472	00839515	00792761	00935305	00378462
10.20	00322571	00752440	00797406	01024193	00419983
10.39	00410644	00108259	00883318	01075314	00424218
10.59	00404382	00125654	00836152	01177982	00384561
10.78	00388431	00112757	00861522	01171195	00422648
10.97	00371950	00591330	00863714	01179362	00425403
11.16	00344074	00144752	00948312	01172701	00407573
11.36	00304101	00121265	00925954	01217185	00437397
11.55	00399215	00158191	00975719	01262215	00414419
11.74	00455662	00132197	00931707	01174257	00454202
11.93	00450619	00129333	01006351	01167433	00413659
12.13	00492322	00137539	01008894	01330514	00441332
12.32	00252334	00718051	00508057	00619207	00253210

YETA 1 = 39.375 GRADOS SEXAGESIMALES

R	* FI	28.13	36.37	50.62	61.87	73.12
2.89	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.08	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.27	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.46	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.65	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.85	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.04	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.23	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.43	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.62	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.81	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
5.00	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
5.20	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
5.39	00006268	00037595	00020759	00002586	00000000	00000000
5.58	00097419	00374568	00095082	00030938	00003775	00000000
5.77	00310281	00716724	00389197	00224504	00010189	00000000
5.97	00408017	00172319	00895651	00764266	00361765	00000000
6.16	00413220	00111933	00101765	01228556	00534204	00000000
6.35	00359715	00084321	00274673	01290163	00494177	00000000
6.54	00261766	00714774	00171768	01022860	00366904	00000000
6.74	00253031	00660337	00537782	00755960	00288137	00000000
6.93	00105742	00482739	00475273	00629747	00247275	00000000
7.12	00197621	00344195	0036719	00465284	00181853	00000000
7.31	00143585	00291624	00291624	00429197	00168421	00000000
7.51	00171526	00351407	00297429	00443548	00184916	00000000
7.70	00164187	00412237	00295843	00446051	00140635	00000000
7.89	00153795	00417314	00292204	00451434	00164270	00000000
8.08	00178375	00428289	00294599	00441820	00162468	00000000
8.28	00178208	00488549	00373354	00429661	00160591	00000000
8.47	00204029	00491761	00387672	00469838	00207291	00000000
8.66	00260519	00363635	004408545	00599235	00226164	00000000

8.65	.00271797	.00741385	.00509353	.00662821	.00275834
9.05	.00303414	.00758373	.00523992	.00687868	.00277402
9.24	.00311244	.00768595	.00748993	.00693155	.00339805
9.43	.00323370	.00727772	.00763403	.01095693	.00405521
9.62	.00403240	.01112921	.00902114	.01057181	.00441675
9.82	.00363820	.01121954	.00885966	.01130035	.00453937
10.01	.00409768	.01022713	.00929626	.01147283	.00414209
10.20	.00512699	.01306512	.00955012	.01151593	.01457446
10.39	.00497257	.01226539	.01360030	.01229556	.00433171
10.59	.00486915	.01345267	.01048511	.01287592	.00523677
10.78	.00416428	.01189531	.00978382	.01292046	.00523365
10.97	.00458560	.01307975	.00967216	.01271191	.00478841
11.16	.00457471	.01410223	.01062696	.01301651	.00477921
11.36	.00522902	.01336443	.01142013	.01325631	.00552945
11.55	.00537970	.01394171	.01111331	.01424393	.00533021
11.74	.00549380	.01489590	.01160303	.01390190	.00533606
11.93	.00592059	.01559117	.01207256	.01412924	.00527004
12.13	.00615216	.01618493	.01220491	.01519204	.00566417
12.32	.00307586	.00814317	.00581692	.00744938	.00342058

TETA 1 = 50.625 GRAJOS SEXAGESIMALES

* FI	19.37	50.62	61.87	73.12	84.38
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.20	.00031726	.00167927	.00041787	.00001864	.00000256
5.39	.00200561	.00518032	.00217084	.00104579	.00037077
5.58	.00363734	.00952302	.00661540	.00397925	.00204569
5.77	.00495180	.01139362	.00948611	.01023996	.00456613
5.97	.00438252	.01170509	.01026144	.01349903	.00503578
6.16	.00349956	.00976578	.00842137	.01168099	.00380542
6.35	.00261016	.00673569	.00689737	.00886182	.00361716
6.54	.00189424	.00634964	.00520109	.00728931	.00282355
6.74	.00179227	.00548047	.00393950	.00521325	.00235004
6.93	.00161687	.00447264	.00349324	.00456397	.00184301
7.12	.00141644	.00402553	.00313707	.00421024	.00166767
7.31	.00167915	.00298053	.00262411	.00417261	.00133459
7.51	.00147116	.00350330	.00287877	.00384203	.00160156
7.70	.00145239	.00355245	.00332950	.00402582	.00143853
7.89	.00179622	.00403303	.00318089	.00483736	.00172082
8.08	.00167810	.00350418	.00396061	.00456486	.00200233
8.28	.00191495	.00612765	.00484504	.00517976	.00223235
8.47	.00240544	.00679375	.00496760	.00636648	.00256926
8.66	.00294466	.00895494	.00665821	.00735841	.00322145
8.85	.00347799	.00946133	.00694515	.00902275	.00349808
9.05	.00379647	.01115230	.00882880	.01054104	.00419431
9.24	.00428184	.01204405	.00955274	.01099921	.00413916
9.43	.00422150	.01252207	.00966444	.01216096	.00535087
9.62	.00486427	.01328565	.01076248	.01333993	.00427755
9.82	.00528390	.01347422	.01069298	.01329203	.00511331



10.01	00501026	01285174	01318718	01189244	00465495
10.20	00521081	01374527	01105646	01271966	00492298
10.39	00504199	01290475	01004963	01355724	00485837
10.59	00537652	01194502	01308274	01368208	00420703
10.78	00488418	01292333	01000203	01282469	00479137
10.97	00519757	01460442	01120001	01257136	00449989
11.16	00465082	01428313	01158723	01359975	00467869
11.36	00502949	01497343	01259490	01499198	00542408
11.55	00574192	01442393	01213281	01572861	00581966
11.74	00560578	01630367	01266972	01509479	00584337
11.93	00576642	01793933	01331064	01624965	00610507
12.13	00573695	01790044	01273321	01723514	00708542
12.32	00299781	00917491	00671577	00667886	00394190

TEYA 1 = 61.875 GRADOS SEXAGESIMALES

\* FI

R \*

	50.62	51.67	73.12	84.38	95.62
2.89	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.08	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.27	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.46	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.66	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.85	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.04	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.23	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.43	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.62	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.81	00020907	00000000	00000000	00000000	00000000
5.00	00132801	00000000	00000000	00000000	00000000
5.20	00304281	00000000	00000000	00000000	00000000
5.39	00519631	00000000	00000000	00000000	00000000
5.58	00732693	00000000	00000000	00000000	00000000
5.77	00944870	00000000	00000000	00000000	00000000
5.97	00294950	00000000	00000000	00000000	00000000
6.16	00249328	00000000	00000000	00000000	00000000
6.35	00167921	00000000	00000000	00000000	00000000
6.54	00188723	00000000	00000000	00000000	00000000
6.74	00150014	00000000	00000000	00000000	00000000
6.93	00151107	00000000	00000000	00000000	00000000
7.12	00115935	00000000	00000000	00000000	00000000
7.31	00141878	00000000	00000000	00000000	00000000
7.51	00168035	00000000	00000000	00000000	00000000
7.70	00181801	00000000	00000000	00000000	00000000
7.89	00183165	00000000	00000000	00000000	00000000
8.08	00234919	00000000	00000000	00000000	00000000
8.28	00234919	00000000	00000000	00000000	00000000
8.47	00332203	00000000	00000000	00000000	00000000
8.66	00341321	00000000	00000000	00000000	00000000
8.85	00430125	00000000	00000000	00000000	00000000
9.05	00491211	00000000	00000000	00000000	00000000
9.24	00528636	00000000	00000000	00000000	00000000
9.43	00530230	00000000	00000000	00000000	00000000
9.62	00525816	00000000	00000000	00000000	00000000
9.82	00492970	00000000	00000000	00000000	00000000
10.01	00501334	00000000	00000000	00000000	00000000
10.20	00556812	00000000	00000000	00000000	00000000
10.39	00450647	00000000	00000000	00000000	00000000
10.59	00493674	00000000	00000000	00000000	00000000
10.78	00525473	00000000	00000000	00000000	00000000
10.97	00522399	00000000	00000000	00000000	00000000



12.32	00430101	0111975	00754783	00958404	00377277
TETA 1 = 84.375 GRAJOS SEXAGESIMALES					
* FI					
R *					
	73.12	84.33	95.62	106.87	118.12
2.89	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.08	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.27	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.46	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.66	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.85	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.04	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.23	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.43	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
4.62	00025765	00044589	00063305	00082077	00100829
4.81	00184794	00399213	000318876	00288401	00128446
5.00	00398157	00987304	00877152	01004258	00385672
5.19	00442622	01265705	01367533	01430486	00506517
5.39	00360064	01135439	00048531	01236802	00445746
5.58	00318386	00937559	00055320	01021206	00440292
5.77	00272849	00683351	00038393	00797239	00290869
5.97	00194612	00599272	00040891	00530896	00180449
6.16	00180115	00406987	00037691	00428348	00155329
6.35	00146523	00271712	00245010	00376144	00149301
6.54	00112539	00315593	00276812	00292213	00130332
6.74	00131455	00267528	00260942	00253285	00103798
6.93	00099239	00290519	000189199	00279952	00099766
7.12	00119812	00285087	00025998	00264491	00075493
7.31	00161319	00228650	00027038	00374666	00140057
7.51	00154150	00377525	00067723	00382333	00158122
7.70	00153045	00397602	00036574	00474609	00171667
7.89	00276421	00596975	00448949	00559219	00213668
8.08	00250376	00781353	00797934	00760459	00280330
8.28	00330333	00819197	00776860	00801139	00321287
8.47	00360845	01008931	00920448	01052209	00375333
8.66	00416196	01107197	01009876	01221000	00429493
8.85	00497451	01314563	01115217	01399804	00517149
9.05	00494594	01334333	01026341	01426360	00508850
9.24	00556112	01355381	01110247	01360576	00480126
9.43	00526529	01238543	01008922	01377949	00459322
9.62	00460931	01336314	00979891	01487513	00576571
9.82	00546927	01281947	00979654	01277095	00583018
10.01	00494751	01257342	00957861	01281675	00517111
10.20	00477396	01299225	00876470	01254037	00474721
10.39	00503415	01252345	01035428	01156075	00471110
10.59	00477434	01234463	01031258	01312499	00427622
10.78	00510037	01232182	01033114	01351833	00476346
10.97	00574935	01237185	01026875	01303456	00518520
11.16	00576794	01402751	01130763	01466846	00526232
11.36	00543350	01571194	01237410	01368162	00536763
11.55	00581911	01592321	01208753	01542907	00545926
11.74	00659611	01743196	01357191	01610502	00649568
11.93	00688512	01890439	01391897	01712220	00699484
12.13	00773363	02020269	01558429	02046782	00742848
12.32	00384789	01031551	00824186	01035530	00457374

TETA 2 = 28.125 GRAJOS SEXAGESIMALES

TETA 1 = 28.125 GRAJOS SEXAGESIMALES







5.59	.00262077	.002935309	.00759958	.00293457	.01056619	.01522033	.00513858
5.77	.00289713	.00777774	.00650256	.00650283	.01025103	.01541926	.00499915
5.97	.00231509	.00298592	.00516016	.00618503	.00657581	.01143222	.00411135
6.16	.00162548	.00544395	.00416733	.00453619	.00561322	.00869356	.00313626
6.35	.00152449	.00379535	.00370336	.00361027	.00469142	.00710163	.00262371
6.54	.00127122	.00405237	.00299657	.00333873	.00410295	.00615349	.00256454
6.74	.00157508	.00384072	.00278948	.00271972	.00317648	.00512032	.00192362
6.93	.001403165	.00445171	.00287007	.00258763	.00242176	.00443742	.00164066
7.12	.00173912	.0056255	.00290729	.00246998	.00263615	.00402020	.00137005
7.31	.00177770	.00477375	.00273574	.00219547	.00332648	.00453869	.00158353
7.51	.00233763	.00522995	.00365302	.00269078	.00308606	.00445354	.00162245
7.70	.00222424	.00571103	.00380515	.00320197	.00437983	.00587797	.00225238
7.89	.00263303	.00686545	.00439348	.00393157	.00469264	.00565654	.00262004
8.08	.00307293	.00847743	.00650456	.00496764	.00568207	.00840686	.00326139
8.28	.00408288	.01032758	.00648669	.00591185	.00667342	.00989370	.00403542
8.47	.00447054	.01251162	.00711107	.00613438	.00700277	.00947707	.00409042
8.66	.00526587	.01301335	.00887868	.00717014	.00832677	.01189445	.00459486
8.85	.00542053	.01346462	.00937941	.00818680	.01001783	.01283672	.00525526
9.05	.00606395	.01499175	.01009123	.00934961	.01129328	.01567669	.00581204
9.24	.00608349	.01536531	.01190078	.01022391	.01057415	.01692690	.00518818
9.43	.00593509	.01712543	.01127137	.01040144	.01150164	.01627805	.00645537
9.62	.00584787	.01720435	.01205935	.01030903	.01145550	.01770961	.00631950
9.82	.00574395	.01721372	.01135757	.01000364	.01116717	.01689495	.00710681
10.01	.00550180	.01612157	.01077878	.00986935	.01056394	.01641811	.00604448
10.20	.00566831	.01522519	.01058400	.00949695	.01038193	.01540775	.00520660
10.39	.00567630	.01496135	.00933626	.00897624	.01106529	.01549472	.00538077
10.59	.00630849	.01640193	.01010675	.00914321	.01062622	.01489460	.00590374
10.78	.00637744	.01644150	.01035980	.01024879	.01218153	.01585355	.00627512
10.97	.00709308	.01783217	.01105588	.00914404	.01205426	.01694591	.00603516
11.16	.00734795	.01814579	.01161522	.01041416	.01171687	.01715316	.00619105
11.36	.00672422	.01753374	.01072876	.01084193	.01174476	.01755010	.00764832
11.55	.00709073	.01944335	.01406236	.01164241	.01208843	.01695853	.00777187
11.74	.00777974	.02300500	.01510932	.01350854	.01391813	.01927215	.00861244
11.93	.00889877	.02400177	.01544639	.01464951	.01352743	.02081066	.00879281
12.13	.00867355	.02379503	.01642755	.01411708	.01456340	.02238027	.00933531
12.32	.00491918	.01180543	.00863340	.00669694	.00809801	.01125267	.00481727

TETA 1 = 73.125 GRAJOS SEXAGESIMALES

\* FI

R	* 50.62	61.87	73.12	84.38	95.62	106.87	118.12
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.65	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00013154	.00243779	.00005620	.00006126	.00000645	.00000000	.00000000
4.62	.00165375	.00300130	.00142122	.00058459	.00034679	.00011481	.00001731
4.81	.00398734	.00965404	.00606454	.00357340	.00263732	.00148199	.00054882
5.00	.00562710	.01337585	.00899454	.00780468	.00654768	.00568164	.00284889
5.20	.007474924	.01239293	.00919870	.00654016	.01039641	.01264284	.00463548
5.39	.00353969	.01027320	.00757425	.00809267	.00910022	.01533627	.00573210
5.58	.00263956	.00753541	.00607867	.00573426	.00766159	.01414865	.00485535
5.77	.00195032	.00611183	.00478267	.00456742	.00608414	.01032048	.00386296
5.97	.00163110	.00543561	.00405295	.00371364	.00450437	.00802646	.00282275
6.16	.00159097	.00432946	.00298309	.00301315	.00355672	.00633450	.00248612
6.35	.00134156	.00422193	.00350836	.00261396	.00350259	.00537396	.00211955
6.54	.00144786	.00380218	.00314506	.00254513	.00329200	.00455637	.00168585

6.74	.00129292	.00364314	.00265337	.00249541	.00276837	.00384132	.00146752
6.93	.00136727	.00389231	.00259994	.00191818	.00227547	.00354166	.00146489
7.12	.00135623	.00423783	.00248269	.00229442	.00255340	.00389120	.00131758
7.31	.00193541	.00491215	.00331198	.0027189	.00273149	.00404459	.00146387
7.51	.00195418	.00524294	.00355126	.00291182	.00329707	.00520165	.00167322
7.70	.00266004	.00749329	.00409274	.00386996	.00440810	.00634521	.00257386
7.89	.00305590	.00820001	.00564207	.00518563	.00543312	.00751925	.00296849
8.08	.00421107	.00957352	.00602099	.00622804	.00723851	.00879739	.00342129
8.23	.00373919	.01083303	.00687783	.00686845	.00787862	.00980135	.00404514
8.47	.00481872	.01225033	.00786452	.00768039	.00950648	.01198056	.00457276
8.66	.00503174	.01424773	.00914525	.00879482	.01011237	.01348545	.00551785
8.85	.00510004	.01516514	.01039314	.01012005	.01108560	.01595771	.00617460
9.05	.00549748	.01485195	.01106591	.00942219	.01089378	.01575049	.00594849
9.24	.00609170	.01696301	.01185954	.00975101	.01191494	.01781803	.00626722
9.43	.00631636	.01692313	.01126192	.01023567	.01121430	.01661857	.00576892
9.62	.00598892	.01723372	.00967768	.00916093	.01115520	.01658394	.00595377
9.82	.00686243	.01703742	.01080298	.00867843	.01113517	.01652749	.00711039
10.01	.00596040	.01554401	.01046517	.00855340	.01051983	.01636234	.00709977
10.20	.00524313	.01393335	.01032471	.00835908	.01060381	.01641064	.00661842
10.39	.00515109	.01397937	.01038607	.00833519	.01054878	.01676928	.00583848
10.59	.00600920	.01554383	.01092424	.00863210	.00946006	.01601472	.00656648
10.78	.00631200	.01623455	.01030067	.00899787	.01022048	.01660045	.00676672
10.97	.00664922	.01823380	.01082495	.01025697	.01167439	.01716943	.00613969
11.16	.00747076	.01804352	.01189306	.01084853	.01142066	.01784473	.00659246
11.36	.00712659	.01815000	.01308426	.01121171	.01248071	.01917225	.00691959
11.55	.00824482	.01985134	.01343925	.01238318	.01337508	.02074053	.00720184
11.74	.00877710	.02225554	.01451695	.01274290	.01401403	.02249703	.00849720
11.93	.00876723	.02289531	.01554000	.01244876	.01463683	.02345140	.00906219
12.13	.00934012	.02453345	.01747452	.01440621	.01529957	.02212753	.00961981
12.32	.00515199	.01275240	.00881078	.00795227	.00779560	.01246895	.00493483

TETA 1 = 84.375 GRAJOS SEXAGESIMALES

* FI							
R *							
* 61.87 73.12 84.38 95.62 106.87 118.12 129.37							
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00015648	.00021784	.00021697	.00019725	.00008355	.00003182	.00000000
4.62	.00188986	.00347592	.00247630	.00233161	.00171424	.00135085	.00048780
4.81	.00446372	.01061520	.00738832	.00626142	.00580216	.00618127	.00328768
5.00	.00571297	.01494392	.01051820	.00804424	.00917469	.01343237	.00563707
5.20	.00482961	.01327285	.00867581	.00758002	.00985012	.00533398	.00556722
5.39	.00368398	.01031596	.00734187	.00701916	.00642109	.01262802	.00445881
5.58	.00287827	.00754293	.00488591	.00501856	.00640018	.01049919	.00327586
5.77	.00211828	.00614426	.00425880	.00423885	.00473347	.00680004	.00267099
5.97	.00201680	.00538954	.00334080	.00307519	.00332617	.00630580	.00225010
6.16	.00152921	.00466163	.00327352	.00295920	.00287726	.00488967	.00202223
6.35	.00151989	.00422325	.00267216	.00278861	.00220524	.00442817	.00168273
6.54	.00129005	.00379345	.00258007	.00235402	.00235195	.00345259	.00152076
6.74	.00119459	.00361280	.00204825	.00231939	.00228458	.00378055	.00148603
6.93	.00167819	.00350734	.00206785	.00172393	.00186822	.00366814	.00136449
7.12	.00164434	.00412376	.00244683	.00270531	.00304380	.00384746	.00161366
7.31	.00213998	.00471754	.00313133	.00304867	.00295864	.00386357	.00141786
7.51	.00257022	.00567763	.00316284	.00405712	.00362311	.00536192	.00255164
7.70	.00273118	.00621127	.00441946	.00439372	.00475335	.00628966	.00265358



7.89	.00352756	.00776312	.00552154	.00567700	.00571679	.00827992	.00166126
8.18	.00423743	.00957277	.00627670	.00649808	.00696610	.01022712	.00376607
8.26	.00447678	.01112270	.00824266	.00764594	.00763622	.01126155	.00447656
8.47	.00503844	.01374285	.00917951	.00879899	.00962765	.01244052	.00529766
8.66	.00621222	.01552149	.01019351	.00855399	.01128415	.01501590	.00536093
8.85	.00590756	.01671391	.01156338	.00967793	.01111233	.01674446	.00620596
9.05	.00666036	.01786173	.01079073	.00983215	.01134745	.01637545	.00678203
9.24	.00621707	.01663372	.01148056	.01003894	.01206886	.01818448	.00629944
9.43	.00591256	.01506352	.01131214	.00942562	.01091221	.01796618	.00523055
9.62	.00623367	.01558364	.01007813	.00944944	.01058030	.01621583	.00592269
9.82	.00621090	.01580780	.01104532	.01014416	.01069672	.01789285	.00662410
10.01	.00583034	.01576582	.01030422	.00903580	.01010724	.01674196	.00586861
10.20	.00565933	.01684557	.00976073	.00829378	.00992453	.01615530	.00603401
10.39	.00583750	.01492273	.01091666	.00967237	.01049854	.01573293	.00588503
10.59	.00563180	.01451982	.00993314	.00902374	.01111878	.01703662	.00626000
10.78	.00538448	.01551290	.00991277	.00994916	.01069520	.01693770	.00607087
10.97	.00647234	.01679931	.01150004	.00936580	.01138936	.01770581	.00512799
11.16	.00751246	.01779779	.01257960	.00955296	.01092011	.01847389	.00761366
11.36	.00673518	.01807194	.01306666	.01029805	.01187627	.02011770	.00729505
11.55	.00823405	.02024943	.01381576	.01218790	.01267881	.01968761	.00736669
11.74	.00846115	.02094393	.01450686	.01294965	.01495948	.02125513	.00824118
11.93	.00912071	.02364335	.01588108	.01340493	.01547833	.02328091	.00944157
12.13	.01041900	.02474635	.01715940	.01510997	.01626434	.02531154	.01084912
12.32	.00513745	.01330678	.00868399	.00809736	.00828032	.01349993	.00536211

TETA 2 =39.375 GRAJOS SEXAGESIMALES

TETA 1 =39.375 GRAJOS SEXAGESIMALES

* FI	5.63	16.67	28.13	39.37	50.62	61.87	73.12	84.38	95.62
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.62	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.81	.00039435	.00028353	.00012818	.000073691	.00002778	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
5.00	.00125190	.00110774	.00082542	.00068759	.00060298	.00050075	.00040000	.00030000	.00020000
5.20	.00359935	.00330185	.00219095	.00195227	.00143080	.0012358	.00081556	.00060000	.00040000
5.39	.00551331	.00429165	.00362453	.00294685	.00197526	.00195758	.00267104	.00203139	.00150000
5.58	.006521097	.00497230	.00437956	.00323404	.00359876	.00328620	.00273432	.00129264	.00040000
5.77	.00392231	.00494563	.00375117	.00351379	.00432443	.00493094	.00707015	.00277402	.00040000
5.97	.00393059	.00311380	.00310104	.00351666	.00285336	.0012242	.00584522	.00419561	.00040000
6.16	.00308815	.00277068	.00267929	.00288676	.00332367	.00459903	.00634768	.00329308	.00040000
6.35	.00260482	.00246545	.00205550	.00254044	.00270331	.00337509	.00655512	.00291469	.00040000
6.54	.00322003	.00227393	.00197097	.00175995	.00265189	.00295800	.00544163	.00214584	.00040000
6.74	.00277821	.00181183	.00185378	.00143310	.00182325	.00267392	.00418190	.00155758	.00040000
6.93	.00287457	.00234577	.00182825	.00162471	.00163369	.00167557	.00317525	.00118320	.00040000
7.12	.00285692	.00214667	.00170187	.00166242	.00132220	.00184004	.00249297	.00108517	.00040000
7.31	.00296781	.00189782	.001203794	.00180956	.00140826	.00189406	.00242874	.00095033	.00040000
7.51	.00310704	.00199123	.00142900	.00135193	.00153427	.00183936	.00236223	.00139002	.00040000
7.70	.00346426	.00276353	.00144418	.00149221	.00165202	.00175437	.00255251	.00104338	.00040000
7.89	.00439280	.00293343	.001261420	.00185260	.00175631	.00250013	.00296300	.00108545	.00040000
8.08	.00507233	.00387302	.0016213	.00179998	.00235356	.00281142	.00352796	.00141113	.00040000
8.28	.00542343	.00387712	.0018768	.00223559	.00221871	.00267750	.00389595	.00120523	.00040000
8.47	.00616123	.00411320	.00351040	.00301657	.00281093	.00311410	.00404391	.00173177	.00040000

8.65	00643151	00317134	00376447	00327867	00282988	00334759	00499572	00176886	00383889
8.65	00690320	00599584	00432564	00360706	00361503	00364802	00571945	00275757	00203000
9.05	00785236	00657124	00489723	00398373	00416274	00435585	00512534	00241325	00203000
9.24	00802664	00342159	00505230	00495581	00495581	00529242	00656463	00245158	00203000
9.43	00784276	00363121	00504748	00435527	00527273	00484041	00676515	00246979	00203000
9.62	00864896	00349345	00456366	00500331	00506847	00457921	00745894	00283843	00203000
9.82	00943799	00369167	00524174	00456302	00443443	00549301	00690691	00316309	00203000
10.01	00876556	00373215	00522448	00457116	00412524	00568396	00875235	00313914	00203000
10.20	00850346	00376228	00513118	00480940	00433156	00595713	00833194	00203000	00203000
10.39	00818186	00366196	00547859	00421459	00407814	00552532	00915296	00357669	00203000
10.59	00832479	00365176	00530405	00479869	00451026	00513010	00880735	00356364	00203000
10.78	00893932	00376731	00484767	00436285	00465934	00556374	00814970	00300997	00203000
10.97	00952244	00377162	00525624	00447264	00542751	00542751	00823177	00294003	00203000
11.16	00911124	00363623	00535282	00474724	00497825	00555519	00975580	00399769	00203000
11.36	00903160	00361107	00561581	00536879	00478745	00680129	00879618	00397985	00203000
11.55	00995080	00367519	00578213	00632954	00531675	00644595	00934555	00241639	00203000
11.74	00910291	00364194	00560339	00597834	00588934	00680654	00953744	00367499	00203000
11.93	00913308	00362042	00710129	00685780	00591729	00611963	01011823	00332731	00203000
12.13	00926275	00361953	00749875	00686615	00613855	00712913	01114115	00370354	00203000
12.32	00626481	00348314	00384363	00289843	00342490	00362765	00587803	00189878	00203000

TETA 1 = 50.625 GRAJOS SEXAGESIMALES

2.89	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	105.37
3.08	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	95.62
3.27	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	84.38
3.46	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	73.12
3.66	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	61.87
3.85	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	50.62
4.04	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	39.37
4.23	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	28.13
4.43	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	16.87
4.62	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	5.62
4.81	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	0.37
5.00	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	0.12
5.20	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	0.87
5.39	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	1.62
5.58	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	2.37
5.77	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	3.12
5.97	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	3.87
6.16	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	4.62
6.35	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	5.37
6.54	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	6.12
6.74	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	6.87
6.93	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	7.62
7.12	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	8.37
7.31	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	9.12
7.51	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	9.87
7.70	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	10.62
7.89	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	11.37
8.08	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	12.12
8.28	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	12.87
8.47	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	13.62
8.66	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	14.37
8.85	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	15.12
9.05	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	15.87
9.24	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	16.62
9.43	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	17.37

9.82	.00544720	.01776573	.01214213	.00972262	.00874560	.00979200	.01075693	.01790819	.00539870
10.01	.00560235	.01722122	.01215139	.00990888	.00865748	.00990260	.01150720	.01883265	.00529318
10.20	.00545182	.01673373	.01231127	.00970145	.00952352	.00990293	.01164862	.01903342	.00582296
10.39	.00601590	.01624972	.01168464	.01004672	.00895513	.00964253	.01120507	.02005829	.00735236
10.59	.00597846	.01749337	.01251913	.01035946	.00960333	.01027666	.01191485	.01845383	.00712959
10.78	.00673854	.01662342	.01331172	.01029678	.00947734	.00927867	.01103440	.01784174	.00593416
10.97	.00700481	.02014023	.01349666	.01171960	.00928870	.00959755	.01230357	.01680742	.00558176
11.16	.00674499	.02056513	.01414773	.01232972	.00983407	.00943624	.01246515	.01819019	.00751418
11.36	.00717968	.02110595	.01446711	.01180559	.01095251	.01139288	.01256349	.02161762	.00309399
11.55	.00761156	.02292381	.01507436	.01189812	.01120767	.01146791	.01350033	.01998921	.00734119
11.74	.00799082	.02386451	.01580620	.01315715	.01171078	.01171044	.01463414	.02159293	.00912649
11.93	.00837276	.02427095	.01698804	.01392449	.01242920	.01226664	.01460177	.02173787	.00889133
12.13	.00881634	.02606220	.01836688	.01528540	.01365354	.01268543	.01518198	.02335384	.00952501
12.32	.00445063	.01363357	.00895898	.00728437	.00697194	.00674290	.00867525	.01148958	.00423539

TETA 1 = 61.875 GRADES SEXAGESIMALES

\* FI  
R \*

	28.13	39.37	50.62	61.87	73.12	84.38	95.62	106.87	113.12
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00013173	.00030157	.00007333	.00003204	.00000315	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.43	.00132705	.00250564	.00134925	.00056823	.00020497	.00000667	.00000426	.00000000	.00000000
4.62	.00341258	.00652589	.00482254	.00297932	.00145224	.00060987	.00030629	.00002395	.00000000
4.81	.00479208	.01352905	.00926201	.00563463	.00402835	.00230630	.00085008	.00022558	.00004540
5.00	.00459458	.01375365	.00978589	.00620804	.00460549	.00259582	.00134595	.00067346	.00095857
5.20	.00326349	.01092953	.00840026	.00791859	.00792569	.00819733	.00853161	.00860553	.00404690
5.39	.00253112	.00876201	.00680126	.00671160	.00661848	.00777730	.01198066	.01568932	.00550132
5.58	.00209532	.00682495	.00499418	.00519353	.00590077	.00692808	.01078051	.01649755	.00572482
5.77	.00168248	.00549297	.00390638	.00398619	.00460632	.00517711	.00809622	.01544997	.00471736
5.97	.00167613	.00478362	.00364259	.00371197	.00339621	.00410885	.00528083	.01098767	.00383873
6.16	.00163196	.00446749	.00299738	.00290911	.00268034	.00388811	.00524973	.00810500	.00334324
6.35	.00120739	.00333527	.00292587	.00231504	.00241254	.00335117	.00441520	.00707931	.00257695
6.54	.00135483	.00363382	.00281309	.00200566	.00241689	.00290827	.00426317	.00642765	.00253482
6.74	.00135974	.00400150	.00272553	.00220951	.00252485	.00288871	.00316213	.00581772	.00239090
6.93	.00173329	.00407348	.00299475	.00264809	.00218600	.00248868	.00319926	.00540667	.00229738
7.12	.00215050	.00506381	.00366913	.00306293	.00274395	.00266643	.00337117	.00477872	.00231177
7.31	.00181319	.00671435	.00377614	.00328111	.00309750	.00304954	.00339117	.00499567	.00219384
7.51	.00267013	.00755523	.00425135	.00338373	.00320173	.00345802	.00406193	.00559928	.00213195
7.70	.00325167	.00893741	.00561325	.00380681	.00398258	.00465434	.00512853	.00641487	.00201643
7.89	.00390762	.01026962	.00566596	.00518844	.00488672	.00479844	.00589528	.00790711	.00271698
8.08	.00424104	.01141131	.00813230	.00684561	.00543843	.00513523	.00700444	.00936781	.00352018
8.28	.00501109	.01320394	.00905272	.00729783	.00670575	.00649929	.00765011	.008112495	.00411737
8.47	.00591272	.01470091	.00996354	.00807708	.00694725	.00747786	.00849294	.01286447	.00533174
8.66	.00639660	.01510423	.01058357	.00939555	.00787035	.00861649	.00981725	.01451800	.00563797
8.85	.00551988	.01646533	.01178164	.01034323	.00892948	.00873325	.01073125	.01627428	.00567581
9.05	.00663203	.01874735	.01234207	.00972503	.00874979	.00975608	.01095177	.01773958	.00524383
9.24	.00677546	.01847275	.01162856	.00919596	.00921222	.00982987	.01270404	.01678468	.00548565
9.43	.00620201	.01704921	.01138624	.00955876	.01004191	.00928787	.01145263	.01786430	.00577228
9.62	.00601043	.01792729	.01174633	.01001123	.00948198	.00955327	.01111776	.01770800	.00542540
9.82	.00584932	.01714150	.01248978	.00922556	.00909617	.00951577	.01212222	.01898950	.00533423
10.01	.00632484	.01730985	.01160069	.00971475	.00940318	.00965034	.01137837	.01903404	.00744246
10.20	.00641299	.01778273	.01121588	.00837584	.00930071	.00957364	.01159720	.01813451	.00585073
10.39	.00612738	.01893385	.01187908	.00892327	.00845461	.00912352	.01144952	.01792791	.00762937
10.59	.00662108	.01895185	.01189284	.01030064	.00910423	.00888698	.01136695	.01774637	.00581398
10.78	.00735971	.01947576	.01283271	.00999762	.00981898	.00981894	.01216834	.01916357	.00752588

10.97 .02660985 .02024140 .01486371 .01091998 .00979669 .01017959 .01192534 .01833238 .00164668  
 11.16 .00872352 .02034453 .01373279 .01097455 .00907513 .01025169 .01333533 .02106337 .00315125  
 11.36 .00779699 .02026793 .01843219 .01184356 .01109767 .01109767 .01354653 .02080704 .00315473  
 11.55 .00913685 .02030563 .01601129 .01340258 .01122313 .01155917 .01433581 .02180774 .00383281  
 11.74 .00959123 .02077015 .01729470 .01397893 .01201695 .01294546 .01537210 .02231610 .00354987  
 11.93 .00963317 .02036253 .01894259 .01503186 .01433714 .01291154 .01602317 .02435037 .00375635  
 12.13 .00922711 .02652315 .02016434 .01562932 .01424325 .01363554 .01726177 .02611002 .00319463  
 12.32 .00499387 .01315743 .01002385 .00779421 .00694888 .00743246 .00834328 .01303046 .00551553

TEIA 1 - 73.125 GRAJOS SEXAGESTIMALES

\* \* FI  
 R \*

	39.37	50.62	61.87	73.12	84.38	95.62	105.87	118.12	129.37
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00004231	.00001535	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00004552	.00007325	.00005901	.00015413	.00019587	.00020422	.00030135	.00030000	.00030000
4.43	.00022345	.00026365	.00027806	.00018275	.00012915	.00046810	.00035818	.00010818	.00030000
4.62	.00047336	.00062119	.00077721	.00052893	.00045616	.00030345	.00016135	.00099656	.00033767
4.81	.00046433	.00014543	.000152369	.000777378	.000692557	.00048750	.00050835	.000454125	.00024896
5.00	.00045253	.00011215	.00037790	.00094996	.00075846	.000541877	.00087611	.000115619	.00095020
5.20	.00034077	.00060712	.00036749	.000637731	.000617829	.00073781	.000945247	.00050099	.00058285
5.39	.000241957	.00073213	.000568010	.000523155	.000468924	.000673669	.00078124	.000450618	.000467804
5.58	.00018806	.000549195	.000387829	.000415891	.000409311	.000529843	.000747721	.000322749	.00041107
5.77	.000168295	.000303195	.000359870	.000389576	.00038919	.000450971	.000508161	.00095358	.00054790
5.97	.000160934	.000471193	.000306324	.000297793	.000324756	.000370685	.000480538	.00031590	.000243788
6.16	.000162699	.000282779	.000204334	.000225723	.000263744	.000281608	.000393592	.00067762	.00027155
6.35	.000106131	.000385361	.000212112	.000272578	.000251980	.000220803	.000314506	.000567470	.000203807
6.54	.00016517	.000400524	.000256254	.00029185	.000239587	.000242920	.000352635	.000536880	.000213448
6.73	.000132705	.000391351	.000314278	.000265713	.000216979	.000246979	.000288942	.000495473	.000181316
6.92	.000166005	.000421042	.000293297	.000270337	.000259470	.000288185	.000327633	.000496023	.000222708
7.12	.00027930	.000516100	.000331802	.000279336	.000245495	.00028478	.000368203	.000537458	.000214881
7.31	.000290784	.000680518	.000422193	.000319407	.000258142	.00030253	.00042296	.000539735	.000204118
7.51	.000299111	.000795230	.000530307	.000366907	.000385931	.000413051	.000459144	.000665521	.000281016
7.70	.000357953	.00096225	.000621262	.000492339	.000394163	.000439039	.000570994	.000808010	.000281506
7.89	.000408061	.001141421	.000723727	.000557866	.000495581	.000527754	.000670398	.000888037	.000364592
8.08	.000483004	.001281352	.000824118	.000663015	.000410323	.000717578	.000809189	.001092974	.000422258
8.28	.00056120	.001461223	.000994530	.00075135	.000776501	.000795483	.000924642	.001284688	.000503294
8.47	.000641898	.001796747	.001330708	.00084959	.000826121	.000875621	.001039798	.001501152	.000594614
8.66	.000748880	.001846285	.00138482	.00097992	.000901880	.000912904	.001236441	.001716068	.000632663
8.85	.000721638	.001815595	.00120421	.000949225	.000904377	.001074616	.001269450	.001809652	.00073888
9.05	.000657870	.001615741	.001161822	.00091287	.000941827	.000953725	.001759785	.001595923	.000539783
9.24	.000693099	.001726331	.001400223	.000951950	.000978194	.000965660	.001194124	.001866506	.000525096
9.43	.000737469	.001765587	.001094792	.001071607	.000926580	.000919188	.001147493	.001698069	.000565706
9.62	.000679556	.001856324	.001171755	.001075928	.000856445	.000919188	.001154093	.001823074	.000564169
9.82	.000687789	.001777493	.001161757	.000840304	.000840328	.000901695	.001101146	.001805562	.00053058
10.01	.000651308	.001584594	.00126492	.000847961	.000830939	.000818587	.001065829	.001976499	.000735962
10.20	.000594414	.001730512	.000806900	.000820630	.00082384	.000846373	.001230482	.001988600	.000735432
10.39	.000639099	.001712565	.001203244	.000847550	.000805325	.000879936	.001147205	.001855238	.00053981
10.59	.000694154	.001887311	.001226577	.000841300	.000836837	.000896516	.001145427	.001987634	.000731774
10.78	.000735375	.002034467	.001307598	.000841300	.000836837	.000896516	.001145427	.001987634	.000731774
10.97	.000834374	.002036384	.001345875	.000841300	.000836837	.000896516	.001145427	.001987634	.000731774
11.16	.000813896	.002130395	.001467328	.000841300	.000836837	.000896516	.001145427	.001987634	.000731774
11.36	.00082627	.002262743	.001615684	.000841300	.000836837	.000896516	.001145427	.001987634	.000731774
11.55	.000951153	.002423059	.001538522	.000841300	.000836837	.000896516	.001145427	.001987634	.000731774
11.74	.000958855	.002476728	.001671307	.000841300	.000836837	.000896516	.001145427	.001987634	.000731774
11.93	.001063991	.002801771	.001855654	.000841300	.000836837	.000896516	.001145427	.001987634	.000731774

12.13 .01012536 .02857191 .01943590 .01583308 .01421208 .01555566 .01770890 .02648285 .01183652  
 12.32 .00522251 .01448486 .01940123 .00813301 .00765048 .00769079 .00917966 .01441461 .00521637

YETA 1 = 84.375 GRAJOS SEXAGESIMALES

\* FI  
 R \*

	50.62	51.87	73.12	84.38	95.62	106.87	118.12	129.37	140.53
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00001537	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00030984	.00037554	.00027815	.00054839	.00038132	.00038913	.00031497	.00004015	.00002889
4.43	.00070720	.00123231	.00260744	.00295269	.00251479	.002171245	.00161872	.00082956	.00027953
4.62	.00120302	.00265427	.006704289	.00602830	.00591510	.00538461	.00486935	.00439813	.00392697
4.81	.0016121	.0042307	.00865862	.00781471	.00799103	.00664124	.00583694	.00492881	.00408536
5.00	.00437023	.01402915	.00879621	.00698496	.00686697	.00623807	.00517379	.00436765	.00350337
5.20	.00361484	.01123229	.00597971	.00551340	.00523109	.00462867	.003919050	.00320563	.00240319
5.39	.00239130	.00285103	.00544349	.00473492	.00457261	.00418924	.00344481	.00274588	.00194306
5.58	.00129232	.00145280	.00452820	.00374580	.00350712	.00319714	.00244442	.00166954	.00084442
5.77	.00144495	.00560204	.00351007	.0025444	.00298170	.00234274	.00199437	.00169314	.00144414
5.97	.00146184	.00457785	.00333778	.00260812	.00252590	.00202172	.00162869	.00125752	.00084442
6.16	.00132033	.00437395	.00279670	.002260812	.002269405	.002295639	.00229414	.00190242	.00162718
6.35	.00140634	.00358407	.00247748	.00245161	.00260331	.00279139	.00272392	.00220939	.00164501
6.54	.00147070	.00365597	.00277735	.002451528	.00245112	.00248081	.002474195	.00197909	.00164501
6.74	.00167528	.00457343	.00298509	.00245501	.00231748	.00212060	.0023846	.001901027	.00163199
6.93	.00168489	.00480385	.00313216	.002418377	.00231519	.00220247	.00232330	.00186988	.00167998
7.12	.00199625	.00513222	.00343373	.00276096	.00279787	.00238664	.00228984	.001896017	.00167998
7.31	.00269828	.00644364	.00424702	.00325463	.00347007	.00349654	.00399024	.0025714	.00225714
7.51	.00299154	.00777333	.00560544	.00393644	.00480274	.00420619	.00375563	.00279854	.00275101
7.70	.00369922	.00897149	.00645051	.00538924	.00637167	.00510353	.00422525	.00354018	.00354021
7.89	.00435773	.0108421	.00736385	.00604133	.00610494	.00616312	.00734471	.00613285	.00613285
8.08	.00586760	.01304035	.008794373	.00794035	.00851037	.0078045	.00887895	.00832035	.00832035
8.26	.0063676	.0151349	.00965093	.00886067	.00950354	.00865289	.00984893	.00925785	.00925785
8.47	.00666944	.01759155	.01063986	.00827958	.00857714	.00889105	.00965557	.00860057	.00860057
8.66	.00670552	.01811463	.01204454	.01023348	.00876192	.00834560	.009126146	.00874408	.00856501
8.85	.00683657	.01750402	.01126884	.00993472	.00972756	.00936296	.009159336	.00827222	.00827222
9.05	.006815639	.01695075	.01168006	.01013308	.00963978	.00991857	.00922016	.0082016	.0082016
9.24	.00677768	.0172531	.01173319	.00927543	.00987194	.00973756	.009177399	.00827516	.00827516
9.43	.00659114	.01787145	.01151970	.00886559	.00943766	.00914938	.00840869	.00722001	.00722001
9.62	.00630368	.01704125	.01095727	.00848582	.00824606	.00837084	.00759585	.00675362	.00675362
9.82	.00635192	.01698322	.01071782	.00872207	.00840689	.00842602	.00744178	.006771667	.006771667
10.01	.00638250	.01575265	.01119668	.00864130	.00860377	.00890497	.00811587	.00755923	.00755923
10.20	.00641892	.01745313	.01092827	.00939765	.00927633	.00981206	.009176158	.00859222	.00859222
10.39	.00662033	.01756319	.01125393	.00924629	.00934632	.00941583	.00933279	.00843377	.00843377
10.59	.006757499	.01613564	.01203945	.00945426	.00945694	.00931718	.009164163	.00874987	.00874987
10.78	.00670370	.01640793	.01150511	.00930394	.009379768	.00947601	.00927256	.00872499	.00872499
10.97	.00759011	.02123365	.01465195	.01105853	.00987305	.00933745	.00934215	.0088467	.0088467
11.16	.00810476	.02123589	.01489889	.01130702	.00956776	.00916386	.00955282	.00914527	.00914527
11.36	.00832754	.02296193	.01454868	.01166337	.00941287	.00925839	.009476621	.00922469	.00922469
11.55	.00885133	.02761245	.01492195	.01282046	.00933678	.009305129	.009150759	.009291523	.009291523
11.74	.00891158	.02654221	.01547085	.01332162	.00930267	.009307297	.009150036	.00944522	.00944522
11.93	.01016144	.02742563	.01845088	.01445183	.00935366	.00950534	.00928506	.00944996	.00944996
12.13	.01098869	.02982265	.01865085	.01551620	.009363730	.00927417	.009171891	.00939705	.00939705
12.32	.00590793	.01524753	.00965148	.00784254	.00715018	.00837325	.00955197	.009562170	.009562170

YETA 2 = 50.625 GRAJOS SEXAGESIMALES

YETA 3 = 50.625 GRAJOS SEXAGESIMALES

• FI •

[illegible]

★ ★ ★ ★ ★

	106.87	118.12
2.89	.0000000	.0000000
3.08	.0000000	.0000000
3.27	.0000000	.0000000





4.62	00334592	00981878	00398862	00866080	00832137	00391978	00262146	00109750
4.61	00756515	00802639	00790937	00669373	00650277	00606049	00510742	00407613
5.00	00288766	00717962	00561065	00596982	00637197	00565688	00693758	00745625
5.20	00192717	00554852	00514211	00410527	00478671	00580432	00674653	00131240
5.39	00173119	00421619	00371033	00357756	00431780	00439070	00675527	00102937
5.58	00130881	00310824	00268272	00298695	00301195	00366675	00496486	00335797
5.77	00122636	00292485	00234942	00248467	00305185	00276044	00342749	00594959
5.97	00122850	00277682	00189230	00235010	00258433	00268608	00346149	00565417
6.16	00170092	00239379	00235723	00231289	00233037	00239328	00331041	00453547
6.35	00125706	00273643	00204421	00222172	00239174	00201828	00316673	00401687
6.54	00158844	00281972	00222217	00272201	00213665	00202103	00303096	00435793
6.74	00131335	00287349	00247788	00215482	00217171	00199115	00299830	00359459
6.93	00199544	00308549	00286408	00296232	00256294	00256420	00280435	00425270
7.12	00192458	00303016	00270743	002313259	002383793	00305991	00283855	00423855
7.31	00244886	00543170	00221453	00394422	00368299	00367169	00369694	00452286
7.51	00244889	00627530	00213908	00446313	00443233	00412058	00462332	00492878
7.70	00397910	00790372	00573142	00578377	00515109	00461372	00542637	00597290
7.89	00479146	00954136	00805303	00688644	00644429	00595920	00667081	00561583
8.08	00516253	00145385	00239529	00646260	00743678	00552768	007655737	00303801
8.28	00509639	00235710	002899185	00281199	00796634	00367206	00785063	00303587
8.47	00550093	001602494	001024317	00951438	00850405	00779829	00861954	00310479
8.66	00565037	001741547	001053246	00215151	00758332	00823433	00930522	00878664
8.85	00584102	001696434	001332919	00689877	00929065	00897476	00877519	00127251
9.05	00577056	001729285	001341209	00111214	00951654	00912278	00908565	001153047
9.24	00550155	00179699	00115220	001017379	00858538	00891932	00991552	00223154
9.43	00620497	001832564	001222167	001054974	00920432	00866985	00921799	001139486
9.62	00546143	00172722	001241472	00947546	00864933	00894611	00929611	00173738
9.82	00564926	001751865	001265706	00952654	00847103	00906300	00946009	00281311
10.01	00598259	001767303	001243722	00955722	00820415	00845587	00919379	001319919
10.20	00627225	00185892	001332406	00999181	00907335	00862106	009562614	001187198
10.39	00602315	002032143	001367471	00973916	00896355	00882818	00955626	001155936
10.59	00671204	001956932	00135017	00106891	00862837	00891436	00968583	001269222
10.78	00734338	002107593	001398517	001142269	00979432	00975669	00969635	001349277
10.97	00728200	00229922	001588805	001216688	00125134	001052520	001091684	001327897
11.16	00821938	00234767	001653558	001409233	001175186	001068196	001079156	001072483
11.36	00826738	002634031	001844954	001516655	001272225	0010397378	001224985	001155936
11.55	00901035	002769198	001944727	001476746	001363255	001241796	001148794	001341405
11.74	00296637	00289523	002047180	001674388	001468208	001295913	001224062	001369125
11.93	00132453	002979390	002096368	001699819	001563296	001411322	001306632	001371637
12.13	00948997	00291249	002044507	001729443	001554552	001443168	001498037	001374753
12.32	00490470	001485942	001006083	00876692	006732289	00788896	00711539	00907673

II 3 \*

2.89	118.12	126.37
3.08	00000000	00000000
3.27	00000000	00000000
3.46	00000000	00000000
3.66	00000000	00000000
3.85	00000000	00000000
4.04	00000000	00000000
4.23	00000000	00000000
4.43	00001478	00000000
4.62	00001675	00000000
4.81	00212537	00000000
5.00	00773354	00344761
5.20	01438785	00637500
5.39	01077470	00566392
5.58	01450742	00546589
5.77	01122554	00376325
5.97	00866636	00502179



6.16	.00797254	.00272402
6.35	.00747579	.00325379
6.54	.00668175	.00239433
6.74	.00640410	.00215310
6.93	.00652916	.00239305
7.12	.00727891	.00287982
7.31	.00762128	.00267159
7.51	.00805177	.00347262
7.70	.00857072	.00359388
7.89	.00912056	.00379972
8.08	.01114273	.00471283
8.28	.01280033	.00541294
8.47	.01453356	.00544155
8.66	.01628617	.00631439
8.85	.01780430	.00634920
9.05	.01751871	.00638491
9.24	.01873355	.00631154
9.43	.01779337	.00712464
9.62	.01785328	.00722792
9.82	.01757418	.00676309
10.01	.01927308	.00663133
10.20	.01920925	.00743459
10.39	.01964459	.00735539
10.59	.02033517	.00752332
10.78	.01960122	.00780213
10.97	.02125738	.00869323
11.16	.02296273	.00876967
11.36	.02333112	.00888982
11.55	.02404896	.00963521
11.74	.02532039	.01089382
11.93	.02704578	.01038005
12.13	.02905616	.01077360
12.32	.01451843	.00493060

TETA 1 = 73.125 GRADOS SEXAGESIMALES

\* FI  
R \*

	28.13	39.37	50.62	61.87	73.12	84.38	95.62	106.87	118.12
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00005851	.00013773	.00005944	.00005654	.00002611	.00001142	.00000000	.00000000	.00000451
4.04	.00139536	.00251741	.00155035	.00114307	.00073268	.00049688	.00034188	.00010207	.00004235
4.23	.00368830	.00891037	.00604645	.00444721	.00361592	.00292000	.00166248	.00066749	.00027478
4.43	.00529424	.01449442	.00894525	.00674898	.00527485	.00523016	.00379333	.00337926	.00181208
4.62	.00425814	.01294364	.00981303	.00689610	.00591565	.00631312	.00633759	.00598121	.00523414
4.81	.00222472	.01125702	.00724678	.00629617	.00522748	.00577145	.00656518	.00748505	.00314044
5.00	.00247957	.00897432	.00602858	.00397509	.00392255	.00439955	.00537816	.00680348	.00384223
5.20	.00206711	.00614704	.00485578	.00380981	.00326922	.00359456	.00427116	.00485606	.00378332
5.39	.00172338	.00460593	.00330722	.00325790	.00268926	.00291957	.00373743	.00419011	.00554503
5.58	.00166776	.00448533	.00307364	.00251170	.00264133	.00270266	.00270550	.00345157	.00523590
5.77	.00118277	.00408163	.00252007	.00227831	.00238791	.00202328	.00246038	.00304753	.00483489
5.97	.00105156	.00391576	.00235399	.00192007	.00186896	.00158390	.00256105	.00280781	.00412076
6.16	.00118656	.00314239	.00209621	.00213214	.00210862	.00161622	.00254062	.00247001	.00349648
6.35	.00127057	.00331353	.00213350	.00205384	.00206300	.00175072	.00236973	.00272284	.00320077
6.54	.00151156	.00414357	.00244711	.00221989	.00178903	.00203575	.00249828	.00265075	.00355453
6.74	.00160838	.00445104	.00310834	.00237044	.00211788	.00221655	.00236967	.00298423	.00397462
6.93	.00210803	.00503513	.00399681	.00278321	.00273037	.00243291	.00280219	.00417548	.00393799
7.12	.00266587	.00746175	.00496683	.00388752	.00340762	.00309361	.00329839	.00405264	.00421193

7.31	.00345154	.00920557	.00624294	.00498498	.00374054	.00339420	.00383734	.00383555	.00477363
7.51	.00399339	.01045374	.01714306	.00697959	.01042810	.00497800	.00497826	.00497828	.00583476
7.70	.00578794	.01375200	.01028783	.00665185	.00606445	.00508251	.00520347	.00622555	.00703669
7.89	.00604267	.01596333	.01032357	.00608254	.00714693	.00576395	.00636321	.00751783	.00317037
8.08	.00712709	.01710525	.01104640	.00679692	.00763795	.00760678	.00799751	.00823279	.0081062
8.28	.00666324	.01771475	.01219175	.00720165	.00812368	.00781643	.00853791	.00875575	.0100286
8.47	.00732764	.01942342	.01346011	.01083008	.00987046	.00856991	.00859093	.00927901	.01071779
8.66	.00670212	.01999474	.01299459	.01054101	.00954191	.00853399	.00849760	.00932404	.01153137
8.85	.00666743	.01930357	.01243009	.01091983	.00883389	.00973080	.00942861	.00987219	.01159862
9.05	.00637679	.01809544	.01198868	.01073187	.01006333	.00954298	.00937803	.00896435	.01194834
9.24	.00618173	.01846235	.01153384	.00959811	.00966870	.00956830	.00929714	.00925006	.01243917
9.43	.00648460	.01727569	.01121498	.00891966	.00926173	.00819912	.00856251	.00962577	.01213864
9.62	.00596097	.01805767	.01261614	.00944694	.00877892	.00849890	.00900976	.00963392	.01135041
9.82	.00635126	.01957582	.01245555	.00954842	.00837325	.00834384	.00861942	.00994481	.01215087
10.01	.00647179	.01785371	.01275691	.00879149	.00824013	.00852760	.00878133	.00956382	.01193596
10.20	.00671487	.01808318	.01389381	.00991314	.00874673	.00873534	.00932546	.01001042	.01252629
10.39	.00699650	.01915283	.01261815	.00987774	.00932555	.00920469	.00977697	.00941654	.01285307
10.59	.00761671	.01997486	.01426748	.01072943	.00925643	.00965172	.00928830	.01056628	.01331996
10.78	.00831609	.02197205	.01566913	.01079526	.00999728	.01018292	.01016863	.01060709	.01357496
10.97	.00873550	.02458463	.01655803	.01260450	.01077369	.01058986	.00959219	.01192278	.01484359
11.16	.00930620	.02457865	.01655607	.01364857	.01217614	.01138405	.01146609	.01175973	.01543568
11.36	.00961090	.02669112	.01914743	.01509207	.01283953	.01245176	.01209047	.01309252	.01585613
11.55	.01095381	.02918384	.01891703	.01623425	.01339573	.01284438	.01427152	.01463896	.01745638
11.74	.01198540	.03064225	.02026767	.01604666	.01329203	.01307249	.01265527	.01377054	.01300275
11.93	.01142646	.03086432	.02194515	.01812578	.01483356	.01377492	.01377372	.01531312	.01902851
12.13	.01146732	.03359445	.02297999	.01897972	.01628076	.01446097	.01410631	.01480822	.01955027
12.32	.00571794	.01718918	.01139952	.00867473	.00737240	.00739656	.00729150	.00829242	.01107063

\* FI  
R \*

	129.37	140.63
2.89	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000
3.66	.00000000	.00000000
3.85	.00000000	.00000000
4.04	.00000000	.00000000
4.23	.00004108	.00000000
4.43	.00071598	.00034591
4.62	.00412434	.00232552
4.81	.00998039	.00485145
5.00	.01372921	.00473180
5.20	.01397859	.00406391
5.39	.01142467	.00388175
5.58	.00872846	.00267429
5.77	.00693660	.00213735
5.97	.00620867	.00179174
6.16	.00528189	.00198453
6.35	.00503760	.00171395
6.54	.00489507	.00200930
6.74	.00595343	.00205563
6.93	.00687953	.00217757
7.12	.00731382	.00264325
7.31	.00807961	.00330991
7.51	.00929139	.00347375
7.70	.01025903	.00447428
7.89	.01180643	.00478131
8.08	.01334230	.00543334
8.28	.01520090	.00525313
8.47	.01624015	.00666740
7.35	.00731314	





11.55 .02694742 .01236304  
11.74 .03089432 .01097995  
11.93 .03059132 .01124569  
12.13 .03011590 .01143137  
12.32 .01603836 .00583269

YETA 2 = 61.875 GRAJOS SEXAGESIMALES

YETA 1 = 61.875 GRAJOS SEXAGESIMALES

\* FI  
R \*

	5.63	16.87	28.13	39.37	50.62	61.87	73.12	84.38	95.52
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.66	.00011234	.00000435	.00000475	.00000476	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.85	.00131989	.00102332	.00069352	.00044487	.00018494	.000023592	.00000000	.00000000	.00000000
4.04	.00524489	.00382165	.00261291	.00172812	.000143749	.000029471	.00000000	.00000000	.00000000
4.23	.00749292	.00581287	.00415137	.00243318	.000333920	.000264491	.000179757	.000120496	.000052889
4.43	.00887740	.00687740	.00480331	.00255867	.000311790	.000288901	.000202049	.000149936	.000092739
4.62	.00559320	.00429735	.00288224	.00122296	.000320227	.000278926	.000237531	.000186574	.000135269
4.81	.00364561	.00239213	.00149726	.000216228	.000199850	.0001231951	.000029640	.00000000	.00000000
5.00	.00509994	.00223272	.001191374	.000151508	.000145786	.000185819	.000204390	.000248625	.000305522
5.20	.00218591	.00159369	.000137449	.000105005	.000124481	.000147298	.000156153	.000191165	.000254368
5.39	.00162455	.000147513	.000110937	.000114527	.000109110	.000130767	.000141995	.000151915	.000173451
5.58	.000151060	.00015237	.000109335	.000133601	.000064759	.000107289	.00010724	.000133727	.000173242
5.77	.00147144	.00015795	.000128814	.000103264	.000172376	.000105271	.000110724	.000100712	.000155403
5.97	.00155659	.00144733	.000124628	.000083928	.000084616	.000128601	.000202224	.000110110	.000137974
6.16	.00143258	.000136361	.000099166	.000083076	.000086579	.000099258	.000364993	.000100724	.000117091
6.35	.00182270	.00144285	.000120395	.000092752	.000111687	.000137425	.000068237	.000095758	.000149091
6.54	.00221544	.00136983	.000109567	.000121906	.000114526	.000096857	.000091561	.000095718	.000133709
6.74	.00207547	.00211915	.000157687	.000126844	.000119527	.000118959	.000113598	.000101514	.000135110
6.93	.00394053	.0021264	.000215976	.000165557	.000126817	.000139863	.00005369	.000147875	.000172330
7.12	.00377978	.00262317	.000282644	.00238016	.000228288	.000178892	.000151418	.000172356	.000195430
7.31	.00474798	.00453335	.00281121	.00279738	.000283377	.000223896	.000206146	.000203146	.000197557
7.51	.00529180	.00453379	.00364243	.00353009	.00330836	.00285516	.00264417	.00254963	.00254963
7.70	.00719342	.00527537	.00423153	.00372320	.00339222	.00019210	.00030361	.000302735	.00289543
7.89	.00754449	.00630343	.00461344	.00450505	.00415036	.000353596	.000393493	.00291377	.00330188
8.08	.00822108	.00723301	.00568380	.00479859	.00465829	.000450313	.000379913	.00359898	.00312704
8.28	.00903571	.00763522	.00636228	.00553041	.00501103	.000443820	.000385101	.00370870	.00334987
8.47	.00983223	.00849339	.00591169	.00560192	.00565318	.00046792	.000399243	.00370922	.00357929
8.66	.00879442	.00649342	.00456823	.00516550	.00491717	.000423912	.000433724	.000469316	.00431255
8.85	.00823112	.00631575	.00508371	.00510557	.00458676	.000395419	.000397407	.000424564	.00505058
9.05	.00789495	.00673383	.00587051	.00537010	.00430190	.000396178	.000415308	.000450625	.00503659
9.24	.00912071	.00710364	.00610401	.00539238	.00448650	.000482520	.000394589	.000452329	.00417011
9.43	.00876220	.00648761	.00549862	.00487757	.00487526	.000433181	.000453215	.000419814	.00499353
9.62	.00741641	.00623779	.00531294	.00469671	.00474921	.000486486	.000485298	.000379484	.00431353
9.82	.00689494	.00561497	.00500538	.00469498	.00481639	.000430289	.00041919	.000437480	.00493588
10.01	.00864226	.00679285	.00548257	.00453511	.00434468	.000360462	.00047558	.000390163	.00492227
10.20	.00975953	.00757469	.00581179	.00449073	.00486711	.000413585	.00047098	.000439039	.00503267
10.39	.01032295	.00975763	.00591645	.00483399	.00466187	.000511893	.000453270	.000496131	.00463915
10.59	.01135285	.00972747	.00635642	.00497384	.00466974	.000466029	.000488964	.000519137	.00463915
10.78	.01150140	.00925352	.00737057	.00679826	.00500520	.000487612	.000527103	.000455792	.00579500
10.97	.01179723	.00950219	.00845935	.00645335	.00573300	.000523668	.000565044	.000572683	.00507151
11.16	.01318672	.01103735	.00842532	.00699348	.00538143	.000621937	.00054700	.000596871	.0053781
11.36	.01337416	.01177393	.01010050	.00748520	.00662188	.000639771	.000636037	.000611043	.00563700
11.55	.01443307	.01238383	.01057196	.00861423	.00756727	.000683669	.000584516	.000585342	.00713803
11.74	.01502395	.01303981	.00993641	.00854343	.00788307	.000694243	.000567923	.000712465	.00735965
11.93	.01573277	.01207371	.01041119	.00916188	.00784406	.000725150	.000579857	.000747965	.00795751
12.13	.01496621	.01344385	.01112418	.00922920	.00800557	.000812958	.000653987	.000705703	.00823526

✱

**R**

3



1

16.87 28.13 39.37 50.62 61.87 73.12 84.38 95.62 106.87



4.43	.00519797	.00494341	.00416579	.00292624
4.62	.00733987	.00664311	.00594744	.00462668
4.81	.00958111	.00744771	.01194624	.00400422
5.00	.00409832	.00645383	.01115495	.00321836
5.20	.00358314	.00532362	.00828387	.00216208
5.39	.00263704	.00416527	.00704944	.00220347
5.58	.00276756	.00346527	.00610506	.00187915
5.77	.00277892	.00313385	.00570500	.00149931
5.97	.00214498	.00281229	.00500972	.00162458
6.16	.00192273	.00267544	.00473850	.00144434
6.35	.00237661	.00319781	.00511467	.00152147
6.54	.00274670	.00315385	.00585346	.00198807
6.74	.00323525	.00372191	.00573531	.00235368
6.93	.00363641	.00454791	.00696607	.00232757
7.12	.00442853	.00544461	.00771048	.00326765
7.31	.00515270	.00673939	.01036675	.00403268
7.51	.00590760	.00842599	.01253108	.00455782
7.70	.00776773	.00955262	.01339734	.00554423
7.89	.00780501	.00980309	.01484772	.00583186
8.08	.00874923	.01054119	.01737560	.00642404
8.28	.00949247	.01177732	.01598154	.00683110
8.47	.00913895	.01227303	.01637564	.00718385
8.66	.00969518	.01167128	.01764473	.00641265
8.85	.01002154	.01253103	.01745254	.00631574
9.05	.00859998	.01286327	.01787815	.00673848
9.24	.00911729	.01134537	.01880129	.00696015
9.43	.00961956	.01145363	.01853170	.00705660
9.62	.00964320	.01147451	.01836938	.00659944
9.82	.00964650	.01287243	.01799152	.00664086
10.01	.00980330	.01351349	.02040878	.00705249
10.20	.01006323	.01363536	.02052372	.00716218
10.39	.01098210	.01386593	.02160170	.00767057
10.59	.01105372	.01400637	.02171290	.00850930
10.78	.01175445	.01559503	.02358341	.00862750
10.97	.01338061	.01724427	.02591598	.00971595
11.16	.01419649	.01767313	.02644850	.00954682
11.36	.01365168	.01811355	.02722278	.01064921
11.55	.01521651	.01796714	.02900271	.01176338
11.74	.01676252	.01952314	.03109673	.01176507
11.93	.01653200	.02010339	.03345649	.01241447
12.13	.01752606	.02180349	.03182808	.01239549
12.32	.00881695	.01085964	.01635147	.00669592

TETA 1 = 24.375 GRADOS SEXAGESIMALES

* FI									
R *									
	28.13	39.37	50.62	61.87	73.12	84.38	95.62	106.87	113.12
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00000000	.00000015	.00000000	.00000000	.00000769	.00000275	.00002284	.00000099	.00000673
3.66	.00007963	.00032524	.00030296	.00053447	.00057774	.00055222	.00050339	.00034169	.00018065
3.85	.00239714	.00325517	.00295895	.00270010	.00278121	.00235266	.00260781	.00178285	.00147224
4.04	.00565735	.01027984	.00743528	.00641734	.00552683	.00572451	.00577929	.00450705	.00433107
4.23	.00600000	.01512582	.01004456	.00770171	.00674361	.00649926	.00590204	.00628938	.00529750
4.43	.00541806	.01442787	.00942663	.00670660	.00528945	.00554680	.00494443	.00551646	.00553939
4.62	.00390820	.01176485	.00677870	.00549470	.00385987	.00403240	.00436548	.00416338	.00484109
4.81	.00250331	.00784789	.00524168	.00369774	.00346459	.00324068	.00289303	.00322518	.00333700
5.00	.00169526	.00557399	.00342907	.00279661	.00251072	.00215288	.00208020	.00268963	.00290380
5.20	.00149397	.00437412	.00269917	.00237717	.00202263	.00185282	.00189872	.00180699	.00233701
5.39	.00146162	.00367439	.00220918	.00201625	.00185961	.00166875	.00122801	.00120304	.00228427



5.58	00119076	00148585	00150345	00148693	00139989	00113218	00146215	00173903
5.77	00116178	002280355	001163940	00159140	00130209	00112777	001113903	00142263
5.97	00100551	00276593	00162782	00169263	00107715	00128604	00132651	00132264
6.15	00121360	00232862	00150924	00145514	00140773	00129551	00150761	00133983
6.35	00157363	00356361	00206887	00187242	00164501	00168825	00168841	00175609
6.54	00201162	00457905	00275655	00190149	00199640	00218257	00188702	00245207
6.74	00297303	00508203	00436854	00310463	00292679	00302068	00310241	00294494
6.93	00375604	00575954	00482295	00437422	00372830	00332157	00355154	00368524
7.12	00426857	00587820	00573908	00538291	00463412	00461934	00438594	00443786
7.31	00491933	00645503	00693426	00795956	00613725	00518470	00595983	00563133
7.51	00566630	00716794	007179510	00771924	00692191	00645154	00669231	00524602
7.70	00716172	00813321	00824448	00949531	00827368	00771995	00777184	00323668
7.89	00723233	00863378	00935895	00926818	00936793	00884763	00869263	00317113
8.08	00815825	00927489	00937270	00972447	00918469	00811415	00869399	00944910
8.27	00875299	00933447	009385137	00940978	00856297	00822983	00870207	00334427
8.47	00829583	00964450	00949712	00937417	00761421	00843908	00773687	00304375
8.66	00823614	00914487	009266117	00857059	00751628	00729079	00745776	00359707
8.85	00845797	00920234	009161937	00867226	00768307	00774471	00791937	00351945
9.05	00842237	00929145	0091245901	00902347	00726295	00848231	00672357	00745162
9.24	00815239	00975257	009167525	00865226	00751508	00702558	00715342	00357695
9.43	00898666	00976297	009121483	00907042	00762372	00736777	00751594	00382596
9.62	00874755	00976380	0091268990	00901536	00754085	00804294	00773887	00705956
9.82	00859536	00976397	009129537	00913382	00805943	00750584	00750002	00325134
10.01	00846049	00978905	0091139871	00941904	00790045	00830726	00807699	00311732
10.20	00842909	00976370	0091232200	00906250	00847163	00861118	00847180	00953963
10.39	00829409	00976370	009113345	00912354	00949497	00898260	00911790	00327499
10.59	00889951	00976785	009123458	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
10.78	00931719	00976972	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
10.97	00914178	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
11.16	00935372	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
11.36	00940909	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
11.55	00911325	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
11.74	00914513	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
11.93	009124892	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
12.13	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
12.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
12.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
12.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
12.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
13.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
13.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
13.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
13.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
13.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
14.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
14.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
14.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
14.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
14.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
15.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
15.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
15.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
15.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
15.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
16.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
16.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
16.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
16.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
16.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
17.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
17.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
17.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
17.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
17.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
18.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
18.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
18.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
18.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
18.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
19.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
19.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
19.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
19.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
19.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
20.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
20.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
20.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
20.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
20.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
21.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
21.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
21.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
21.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
21.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
22.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
22.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
22.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
22.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
22.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
23.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
23.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
23.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
23.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
23.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
24.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
24.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
24.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
24.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
24.92	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
25.12	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
25.32	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
25.52	00935796	00976321	009123489	00928472	00949030	00936335	009103785	00320392
25.72	00935796	00976321	009123489	00928472	00			

7.12	.00537359	.00473120	.01019298	.00435400
7.31	.00544446	.00786483	.01267281	.00512368
7.51	.00776147	.00518303	.01372162	.00536544
7.70	.00845377	.01002385	.01477127	.00605651
7.89	.00995450	.01059912	.01753007	.00680376
8.08	.00939972	.01262404	.01964036	.00763236
8.26	.00936944	.01237704	.01825250	.00707900
8.47	.00537026	.01208750	.01884092	.00707268
8.65	.00927192	.01135331	.01789948	.00674271
8.85	.00969805	.01135387	.01806534	.00639876
9.05	.00879287	.01198781	.01828747	.00618028
9.24	.00873828	.01129310	.01791251	.00602059
9.43	.00964225	.01078965	.01781331	.00620327
9.62	.00936013	.01150505	.01916343	.00739625
9.82	.00955997	.01229049	.01868586	.00712981
10.01	.01060903	.01252361	.01973784	.00681083
10.20	.01217741	.01455266	.02036038	.00731551
10.39	.01201693	.01557145	.02216092	.00791048
10.59	.01240346	.01565080	.02352551	.00896167
10.78	.01347956	.01648573	.02588925	.00931509
10.97	.01407933	.01836392	.02692161	.00939352
11.16	.01540667	.01921323	.02828601	.01054861
11.36	.01658391	.02064532	.02955038	.01081721
11.55	.01657860	.02076340	.02936505	.01154217
11.74	.01664690	.02071515	.03130138	.01166053
11.93	.01853160	.02241311	.03162672	.01202550
12.13	.01841258	.02234524	.03367778	.01182124
12.32	.00991709	.01168564	.01645437	.00629707

TETA 2 = 73.125 GRAJOS SEXAGESIMALES

TETA 1 = 73.125 GRAJOS SEXAGESIMALES

\* FI

	5.62	16.87	28.13	39.37	50.62	61.87	73.12	84.38	95.62
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00039469	.00017447	.00029296	.00024182	.00020552	.00020673	.00017117	.00011342	.00002870
3.66	.00466214	.00363206	.00254701	.00251294	.00182634	.00120094	.00094663	.00092903	.00072509
3.85	.01249571	.00957463	.00619704	.00476977	.00419598	.00309685	.00254068	.00262581	.00213936
4.04	.01295681	.00971521	.00637929	.00539035	.00433684	.00360753	.00362947	.00258315	.00317333
4.23	.01025672	.00760489	.00519658	.00434706	.00361614	.00269858	.00333389	.00295195	.00257763
4.43	.00594395	.00404164	.00360253	.00292142	.00215152	.00232479	.00228217	.00223936	.00214115
4.62	.00375959	.00313975	.00231510	.00188896	.00145011	.00138983	.00148316	.00165603	.00163341
4.81	.00220847	.00255362	.00190347	.00117851	.00112308	.00110280	.00128363	.00108999	.00123628
5.00	.00161477	.00165292	.00128422	.00090456	.00092252	.00089258	.00078191	.00079107	.00104413
5.20	.00149153	.00132900	.00115931	.00082363	.00078425	.00085178	.00066743	.00058620	.00103119
5.39	.00164863	.00132315	.00132338	.00134416	.00068860	.00057570	.000352879	.00063410	.00063512
5.58	.00091555	.00083104	.00099487	.00094879	.00076468	.00063413	.00054200	.00047549	.00073626
5.77	.00095354	.00086600	.00100934	.00079749	.00081336	.00088857	.00064089	.00056277	.00057419
5.97	.00162116	.00117190	.00085175	.00059848	.00078320	.00066823	.00085694	.00072626	.00107758
6.16	.00184486	.00127264	.00092944	.00065725	.00074175	.00060376	.00086416	.00079203	.00083978
6.35	.00195211	.00174362	.00129051	.00056990	.00074500	.00084462	.00079141	.00088178	.00109761
6.54	.00260559	.00272620	.00141779	.00103051	.00105530	.00093379	.00118875	.00097555	.00115033
6.74	.00342194	.00283567	.00190835	.00182245	.00151465	.00137958	.00142708	.00143091	.00179606
6.93	.00516572	.00384274	.00329290	.00267883	.00246883	.00198979	.00173575	.00235881	.00201091
7.12	.00721413	.00567717	.00431736	.00319932	.00262204	.00236819	.00276537	.00259084	.00225686
7.31	.00804535	.00673552	.00482992	.00443085	.00338960	.00330416	.00342626	.00350219	.00283124
7.51	.00929281	.00772525	.00576568	.00570028	.00488202	.00432811	.00360879	.00350243	.00319238
7.70	.01064372	.00801313	.00598361	.00616762	.00527362	.00461270	.00407271	.00423233	.00405786

.89	.00166757	.00652229	.00655669	.00620682	.00002696	.00485285	.00417116	.00482795	.00394882
.08	.00133548	.003952143	.00663288	.006371575	.00475582	.00534365	.00468869	.00474614	.00403748
.28	.00542966	.00774537	.00601293	.00553467	.00576503	.00512452	.00444298	.00395697	.00362694
.47	.000973698	.00606531	.00614293	.00491004	.00438810	.00402073	.00406931	.00354265	.00363182
.66	.00044701	.00735535	.00605374	.00466477	.00374274	.00405937	.00380913	.00349904	.00363518
.85	.00755506	.00738227	.00568337	.00486511	.00364583	.00338956	.00358975	.00296043	.00329219
.05	.00548899	.00690527	.00541100	.00473832	.00397755	.00340456	.00358598	.00281886	.00285105
.24	.00879612	.00676189	.00513665	.00450878	.00419070	.00349117	.00376589	.00319750	.00315836
.43	.00963793	.00662069	.00492331	.00404570	.00405690	.00391549	.00391073	.00339759	.00355537
.62	.00999604	.00726550	.00548917	.00450270	.00402348	.00410894	.00428474	.00425595	.00411835
.82	.00969373	.00723002	.00507779	.00435996	.00456832	.00449344	.00416419	.00400431	.00343941
.01	.00573299	.00624782	.00568161	.00452286	.00477384	.00437202	.00381910	.00419144	.00437638
.20	.00784263	.00928973	.00707351	.00499788	.00515754	.00442242	.00442545	.00423588	.00467390
.39	.00124446	.00917361	.00746499	.00560964	.00465400	.00496705	.00471967	.00405832	.00511322
.59	.001370894	.00921591	.00774952	.00672317	.00537877	.00519615	.00510936	.00552180	.00534183
.78	.001418452	.00925997	.00872893	.00643852	.00617698	.00561670	.00554001	.00560609	.00574037
.97	.001522013	.00929105	.00916151	.00687135	.00693194	.00635438	.00626099	.00679040	.00534457
.16	.001492062	.00927719	.00900568	.00813736	.00767857	.00678981	.00726517	.00746224	.00595039
.36	.001561595	.00929345	.00906187	.00798427	.00818915	.00715582	.00703403	.00758838	.00703774
.55	.001537024	.009340931	.00997061	.00889275	.00816412	.00746162	.00698660	.00794767	.00729385
.74	.001725214	.009416333	.001140217	.00913627	.00863028	.00736181	.00736678	.00759415	.00761131
.93	.001615956	.009465164	.001077205	.00820550	.00784949	.00681643	.00731740	.00734795	.00727218
.13	.001638468	.009441371	.001079619	.00900306	.00831989	.00776779	.00826239	.00747462	.00755492
.32	.000835205	.009687231	.00551223	.00462826	.00444906	.00400413	.00379780	.00380833	.00345466

FI

	106.87	118.12	129.37	140.63	151.87	163.12
.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
.46	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
.66	.00024438	.00017781	.00002284	.00000000	.00000358	.00000000
.85	.00140212	.00078584	.00026725	.00004460	.00008676	.00000000
.04	.00267786	.00194495	.00149384	.00108487	.00066734	.00000000
.23	.00271757	.00259201	.00208253	.00140382	.00163246	.00000000
.43	.00210016	.00211414	.00396373	.00516337	.00245766	.00000000
.62	.00210006	.00237512	.00346268	.00532615	.00193939	.00000000
.81	.00149610	.00141752	.00276926	.00481631	.00153573	.00000000
.00	.00115598	.00136365	.00202566	.00337419	.00075796	.00000000
.20	.00108363	.00114373	.00183810	.00264281	.00063456	.00000000
.39	.00076508	.00102385	.00137051	.00208745	.00067262	.00000000
.58	.00069428	.00084012	.00103814	.00201535	.00066419	.00000000
.77	.00070487	.00082348	.00111453	.00194912	.00057178	.00000000
.97	.00052657	.00094552	.00105294	.00183690	.00073857	.00000000
.16	.00084018	.00107155	.00117610	.00202979	.00074620	.00000000
.35	.00090697	.00127586	.00149678	.00233954	.00088644	.00000000
.54	.00113625	.00138579	.00190208	.00319626	.00104817	.00000000
.74	.00154310	.00196526	.00217924	.00347466	.00117036	.00000000
.93	.00125967	.00275331	.00276994	.00363833	.00159841	.00000000
.12	.00218234	.00252768	.00376144	.00492264	.00244383	.00000000
.31	.00246396	.00320957	.00412567	.00677197	.00261340	.00000000
.51	.00350660	.00377141	.00566186	.00806970	.00371246	.00000000
.70	.00293465	.00441415	.00571627	.00884976	.00397234	.00000000
.89	.00233573	.00524584	.00567911	.00874612	.00418335	.00000000
.08	.00432505	.00493230	.00566374	.00926460	.00379725	.00000000
.28	.00426832	.00486217	.00570794	.01001101	.00342401	.00000000
.47	.00364651	.00484727	.00584824	.00915685	.00360941	.00000000
.66	.00364237	.00455477	.00522989	.00989148	.00378725	.00000000
.85	.00379240	.00443434	.00602713	.00994515	.00307676	.00000000
.05	.00336021	.00452369	.00596250	.00934688	.00317204	.00000000
.24	.00368453	.00403119	.00572716	.00812372	.00328666	.00000000

9.43	003771599	00453574	00559837	00559158	00339265	00000000	00000000
9.62	00392450	00499583	00532869	00533349	00569379	00000000	00000000
9.82	00430872	00521365	00581581	00581581	00598610	00000000	00000000
10.01	00421129	00492319	00648635	00550774	00324648	00000000	00000000
10.20	00501473	00543915	00668737	001016369	00034392	00000000	00000000
10.39	00565352	00547319	00718931	00113656	00040821	00000000	00000000
10.59	00550894	00637335	00839038	001347551	000423320	00000000	00000000
10.78	00513254	00662799	00903994	001319487	000446070	00000000	00000000
10.97	00650176	00679177	00908846	001351743	000503125	00000000	00000000
11.16	00692941	00744465	00927741	001413612	000544652	00000000	00000000
1.36	00725135	00771397	01031221	001535293	000525137	00000000	00000000
1.55	00847230	00847230	00914466	001521517	000573268	00000000	00000000
1.74	0092678	00891371	01096819	001648632	000639953	00000000	00000000
1.93	00973136	00951376	01073320	001620951	000714280	00000000	00000000
2.13	00807678	00904151	01094075	001781723	000629710	00000000	00000000
2.32	00360706	00428143	00533041	000666195	000310552	00000000	00000000

TEIA 1 = 84.375 GRAJOS SEXAGESIMALES

\* FI

106.87	00000000	28.13	39.37	50.62	61.87	73.12	84.38	95.62	105.87
2.89	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.08	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.27	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000	00000000
3.46	00058456	00066333	00067391	00062527	00093453	00101385	00109746	00098268	00074876
3.66	00440030	00625243	00051047	000527955	000508677	000412184	000422502	000365712	000365712
3.85	01012321	02198345	01399653	01067381	00901929	00777702	00669209	00718008	00712879
4.04	00829236	02359333	01591376	01392710	00878402	00732191	00655975	00645222	00650126
4.23	00622179	01645183	01144519	00873263	00649976	00578010	00454292	00537748	00454452
4.43	00411372	01149289	00768239	00538146	00444789	00368899	00293053	00298664	00335710
4.62	00275117	00839359	00473261	00364928	00301142	00261071	00236118	00226374	00233519
4.81	00149921	00528193	00359928	00206741	00188696	00199723	00171585	00151292	00199838
5.00	00134215	00417479	00292929	00206740	00196655	00160125	00129218	00140644	00151838
5.20	00124538	00370333	00256278	00193794	00170588	00138437	00111591	00113298	00144011
5.39	00135172	00357325	00205927	00125729	00155026	00111953	00110841	00087289	00087339
5.58	00098551	00295377	00203842	00167555	00113974	00096876	00074323	000314857	00113042
5.77	00092477	00303701	00204227	00138968	00116431	00102413	00093971	00024628	00087891
5.97	00120823	00282708	00171788	00135412	00121181	00099496	00104613	00031456	00125153
6.16	00118023	00408357	00209822	00174822	00130869	00120385	001331659	00032452	00142937
6.35	00162328	00439375	00304099	00229732	00177930	00188418	00176770	00191004	00211566
6.54	00228995	00592183	00396107	00300367	00252436	00241894	00289982	00257423	00241812
6.74	00272956	00612211	00575287	00475421	00387647	00316500	00327954	00341247	00000000
6.93	00423829	01108384	00743598	00522078	00475847	00446014	00441776	00454141	00457471
7.12	00509352	01483334	00944525	00619575	00645426	00554587	00558624	00527257	00563621
7.31	00529578	01644916	01266743	00945293	00893550	00725465	00665018	00664246	00564336
7.51	00632205	01948383	01478806	01129606	01029567	00860149	00777032	00779097	00701178
7.70	00759702	02063183	01493937	01270564	01037079	00982499	00902040	00862075	00839171
7.89	00896422	02266188	01427821	01217778	01036675	01043033	00968049	00874124	00913068
8.08	00971378	02115331	01385526	01195343	01051443	00998647	00928586	00916250	00853748
8.28	00741938	02021933	01300311	01045801	01034690	00945638	00843624	00817362	00763684
8.47	00657796	01918265	01285546	00969135	00903506	00787989	00708802	00716987	00735530
8.66	00617866	01878984	01217587	00969969	00768700	00756789	00702243	00676256	00589953
8.85	00679333	01717743	01229806	00880948	00761585	00682234	00590136	00636219	00593019
9.05	00502069	01669394	01041595	00808238	00763545	00695212	00649895	00623947	00599722
9.24	00548846	01561375	01088116	00870312	00750335	00683450	00645352	00536905	00579365
9.43	006280830	01599913	01211951	00909300	00774708	00749236	00656293	00643012	00535654
9.62	00571079	01724301	01236731	00910963	00768911	00768134	00745817	00745817	00701746
9.82	00562050	01879142	01268518	00983669	00891448	00843985	00839084	00771659	00845541
0.01	00558899	01890561	01275935	01023317	00927417	00890806	008794341	00821655	00823396
0.20	00687762	02048973	01530587	01269651	01002404	00895485	01007450	00938472	00872848
0.39	00811594	02350344	01683875	01438013	01146356	01029422	01104106	01043715	01044579

10.59	.00946111	.02573712	.01756612	.01478978	.01223232	.01134467	.01151880	.01263929	.01397492
10.73	.01032230	.02605683	.01993660	.01542703	.01371884	.01429850	.01253287	.01290941	.01233654
10.97	.01093236	.03154364	.02026279	.01699961	.01455544	.01398733	.01430964	.01402711	.01265710
11.16	.01158062	.03180213	.02092359	.01736797	.01566833	.01497396	.01510997	.01402193	.01339814
11.36	.01160590	.03290492	.02242632	.01815414	.01606243	.01473393	.01517673	.01424356	.01373588
11.55	.01222605	.03424685	.02441074	.01802078	.01662660	.01500766	.01439467	.01436492	.01487849
11.74	.01165263	.03542183	.02372084	.01841657	.01725601	.01627505	.01416720	.01397952	.01465016
11.93	.01157866	.03625195	.02577135	.01853979	.01683983	.01612910	.01463488	.01401545	.01309882
12.13	.01125168	.03569375	.02481744	.01919160	.01736041	.01637925	.01490430	.01458541	.01382350
12.32	.00595707	.01774159	.01230997	.00955882	.00906901	.00761853	.00678111	.00660626	.00723249

\* FI

R \*

	116.12	129.37	140.63	151.87	162.11	174.37
2.89	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.08	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.27	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000	.00000000
3.46	.00049706	.00029179	.00007509	.00001895	.00001420	.00000000
3.66	.00021497	.000245923	.00196038	.00127943	.00070598	.000081428
3.85	.000674043	.00017494	.000607766	.00490544	.00497458	.00410113
4.04	.000697647	.000741301	.000917472	.00923213	.01244469	.00751770
4.23	.000509876	.000639003	.000867751	.01035251	.01535423	.00604460
4.43	.00032324	.000457421	.000600698	.00785717	.01398177	.00467949
4.62	.000266312	.000253595	.000426795	.00601003	.00939552	.00314975
4.81	.000173967	.000242414	.000310583	.00426826	.00716061	.00287297
5.00	.000166026	.000174375	.000232155	.00375114	.00520668	.00218776
5.20	.000138039	.000128332	.000151528	.00307494	.00398248	.00129712
5.39	.000093527	.000134091	.000177449	.00241161	.00311358	.00106879
5.58	.000094928	.000123471	.000136141	.00186875	.00304204	.00088882
5.77	.000114329	.000116169	.000137196	.00176032	.00258504	.00099033
5.97	.000099369	.000131361	.000164619	.00200038	.00210710	.00118323
6.16	.000119156	.000122559	.000147807	.00226180	.00349534	.00103416
6.35	.000176396	.000179557	.000206834	.00281750	.00437298	.00155665
6.54	.000241954	.000245569	.000264281	.00359225	.00505526	.00208100
6.74	.000327713	.000366450	.000407126	.00461884	.00711218	.00323398
6.93	.000412385	.000538791	.000616059	.00669367	.00977466	.00401663
7.12	.000510155	.000551185	.000707431	.00913296	.01383999	.00517773
7.31	.000665944	.000791568	.000961485	.01133791	.01569707	.00587321
7.51	.000815634	.000946189	.000949416	.01229250	.01770613	.00672182
7.70	.000931288	.000976037	.01047295	.01260515	.01964946	.00775211
7.89	.000976402	.000927049	.01010311	.01182115	.01979758	.00849303
8.08	.000953468	.000854991	.010304832	.01206744	.02039690	.00840189
8.26	.000751304	.000903103	.010000774	.01215957	.02004909	.00805693
8.47	.000699530	.000831513	.000870686	.01167930	.01958200	.00718008
8.66	.000683728	.000805433	.000931580	.01131143	.01763455	.00744070
8.85	.000711681	.000780575	.000868865	.01160337	.01761112	.00621719
9.05	.000672421	.000695925	.000895235	.01106619	.01703128	.00605127
9.24	.000625404	.000747601	.000833075	.01080190	.01623255	.00592655
9.43	.000641511	.000725125	.000869822	.01131683	.01705628	.00648345
9.62	.000643360	.000620134	.000925895	.01124970	.01931468	.00639849
9.82	.000602998	.000618094	.000986527	.01251025	.01969218	.00654419
10.01	.000617630	.000956531	.01092822	.01240475	.01918012	.00645219
10.20	.000982370	.001149334	.01124322	.01477569	.02070257	.00716431
10.39	.001113659	.01029722	.01278148	.01506812	.02279079	.00807220
10.59	.001176139	.01230050	.01400340	.01730254	.02580922	.01024730
10.78	.001212201	.01431509	.01537398	.01839361	.02757074	.01072165
10.97	.001480674	.01483334	.01589850	.01958545	.02989705	.01079301
11.16	.001462031	.01514568	.01624431	.01860559	.03161601	.01145489
11.36	.001517577	.01608132	.01720455	.020005051	.03181422	.01254629
11.55	.001501621	.01672003	.01730677	.02131479	.03478832	.01365101
11.74	.001676728	.01779933	.01946062	.02119537	.03732919	.01374668
11.93	.001511411	.01765397	.01868673	.02375161	.03746567	.01323746

TETA 1 = 84.375 GRADOS SEXAGESIMALES

\* FI

[illegible]

35 IN